

UNIVERSITE DE MONTPELLIER

FACULTE DES SCIENCES

T H E S E

présentée à la Faculté des Sciences de Montpellier
pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences Physiques

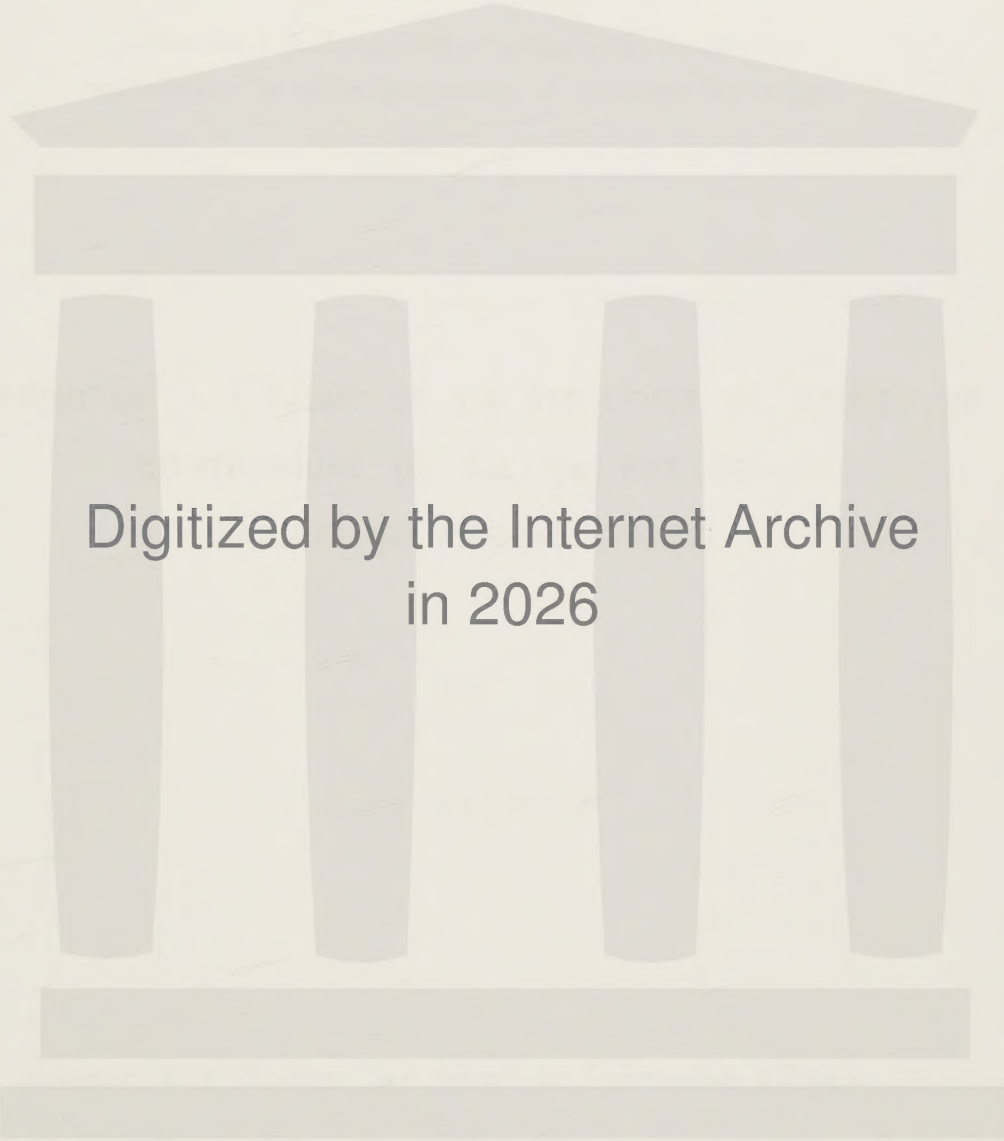
CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA STRUCTURE DE BANDES DE
L'ANTIMONIURE DE GALLIUM PAR DES
MESURES DE PIEZORESISTANCE.

par

Michel AVEROUS

Soutenue le 4 Octobre 1969 devant la Commission d'Examen.

JURY : MM.	B. PISTOULET,	Président	
	M. SAVELLI,	}	Assesseurs
	G. BOUGNOT,		
	C. CHALIN,	}	Invités
	M. RODOT,		



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551917_0016

UNIVERSITE DE MONTPELLIER

FACULTE DES SCIENCES

T H E S E

présentée à la Faculté des Sciences de Montpellier
pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences Physiques

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA STRUCTURE DE BANDES DE
L'ANTIMONIURE DE GALLIUM PAR DES
MESURES DE PIEZORESISTANCE.

par

Michel AVEROUS

Soutenue le 4 Octobre 1969 devant la Commission d'Examen.

JURY :	MM.	B. PISTOULET,		Président
		M. SAVELLI,	}	Assesseurs
		G. BOUGNOT,		
		C. CHALIN,	}	Invités
		M. RODOT,		



Doyen honoraire : P. MATHIAS

Doyen : P. DUMONTET

<u>Professeurs honoraires</u> :	R. JACQUES	J. SOULA
	M. CASTERAS	G. DENISOT
	E. CARRIERE	J. GRANIER
	E. TURRIERE	Ch. BOUHET

Professeurs titulaires :

M.	M. MOUSSERON	Chimie Organique
M.	J. P. ROIG	Physique
M.	P. CHATELAIN	Minéralogie
Mlle	O. TUZET	Zoologie
M.	G. COUCHET	Mécanique supérieure
M.	J. SALVINIEN	Chimie-Physique
Mlle	A. M. VERGNOUX	Physique
M.	J. AVIAS	Géologie
M.	P. VIELES	Chimie
M.	J. RABINOVITCH	Physique (C. S. U. P.)
M.	E. KAHANE	Chimie Biologique
M.	J. J. MOREAU	Mécanique rationnelle
M.	B. CHARLES	Mathématiques pures
M.	J. MOTTE	Biologie végétale
M.	R. JOUTY	Physique
M.	P. DUMONTET	Physique
M.	R. LEGENDRE	Zoologie
M.	I. ASSENMACHER	Physiologie Animale
M.	A. CASADEVALL	Chimie Organique

M.	B. PISTOULET	Physique
M.	Ch. ROUMIEU	Analyse supérieure
M.	J. ROBIN	Physique
M.	A. POTIER	Labo. Acides Minéraux
M.	R. LAFONT	Physique
M.	R. JACQUIER	Chimie
M.	J. FALGUEIRETTES	Minéralogie
M.	J. REGNIER	Chimie
Mme	J. CHARLES	Mathématiques
M.	P. CAILLON	Physique
M.	J. ROUZAUD	Chimie
M.	Ch. SAUVAGE	Botanique
M.	H. CHRISTOL	Chimie (E.N.S.I.)
Mme	G. VERNET	Biologie animale
M.	L. CECCHI	Physique
M.	H. ANDRILLAT	Astronomie
M.	M. SAVELLI	Physique
M.	M. MATTAUER	Géologie
M.	L. EUZET	Zoologie (C.S.U P.)
M.	C. DELOUPY	Physique
M.	L. GRAMBAST	Botanique
M.	A. BONNET	Botanique
M.	G. LAMATY	Chimie

Professeurs sans chaire :

Mme	M.L. POUQUES	Botanique (C.S.U P.)
M.	P. MURAOUR	Géophysique appliquée
M.	G. TOURNE	Chimie

M. J. REMY	Géologie
M. P. DEMANGEON	Géologie
Mme S. ROBIN	Physique
Mme Ch. DUBOUL-RAZAVET	Géologie (C.S. U. P.)
M. E. GROUBERT	Physique
Mme H. GUASTALLA	Biologie Physico-chimique
M. F. PROUST	Géologie
Mlle A. BAILLETTE	Mathématiques (C. S. U. P.)
M. A. BASSOMPIERRE	Physique
M. R. MARTY	Psychophysiologie
M. M. MAURIN	Chimie
M. N. ROBY	Mathématiques
Mme N. PARIS	Physiologie végétale

Professeurs associés :

M. E. AKUTOWICZ	Mathématiques
M. A. MICALI	Mathématiques
M. C. VAGO	Biologie animale
M. K. KOHLER	Biochimie

Maîtres de conférences :

M. R. GAUFRES	Chimie
M. J. J. SOULIER	Chimie (C. S. U. P.)
M. J. PARIS	Zoologie
M. P. MOLINO	Mathématiques
M. G. BOUGNOT	Physique
M. Y. GUITTON	Physiologie végétale

M. G. BOMBRE	Physique (C. S. U. P.)
M. C. PUISSEGUR	Biologie animale (C. S. U. P.)
M. P. VIALLET	Chimie (C. S. U. P.)
M. J. M. MORETTI	Chimie
M. L. THALER	Géologie
M. J. LEGRAND	Physiologie animale
M. M. ROUZEYRE	Physique
M. P. SABATIER	Mathématiques
M. Ch. CASTAING	Mathématiques
M. J. D. BAYLE	Physiologie animale
Mme M. HAKIM	Mathématiques
M. R. HAKIM	Mathématiques
M. M. BAUSSET	Mathématiques (C. S. U.)
M. G. LOUPIAS	Mathématiques
M. G. MASCHERPA	Chimie

Maîtres de conférences associés :

M. Y. CORMARY	Géologie
M. D. DULL	Chimie

Chargés d'Enseignement :

M. M. LEFRANC	Mathématiques
Mlle Ch. BARBANCE	Mathématiques

A mes parents,

A ma femme, à mes enfants,

A tous les miens.

Ce travail a été effectué dans le cadre du Centre d'Etudes d'Electronique des Solides de la Faculté des Sciences de Montpellier sous la direction de Monsieur le Professeur G. BOUGNOT.

Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de ma profonde gratitude pour m'avoir dirigé et soutenu efficacement tout au long de ce travail.

Je remercie également Monsieur le Professeur B. PISTOULET qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse, ainsi que Monsieur le Professeur M. SAVELLI qui a bien voulu en faire partie.

Monsieur M. RODOT, Directeur du Laboratoire de Magnétisme au Centre National de la Recherche Scientifique, m'a fait le grand honneur de participer à ce jury, il m'a toujours reçu dans son Laboratoire avec la plus grande amabilité, et les discussions que j'ai eues avec lui à l'occasion de chacune de mes visites m'ont été d'un précieux secours. Qu'il trouve ici l'expression de mes sincères remerciements et de ma profonde gratitude.

Que Monsieur le Professeur CHALIN, Recteur de l'Académie de Toulouse, trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance. Il m'a considérablement aidé au début de ces travaux en m'accueillant dans son Laboratoire et en me dirigeant sur ce sujet.

Je remercie également Monsieur B. VODAR, Directeur du Laboratoire des Hautes pressions au Centre National de la Recherche Scientifique pour l'assistance technique que son Laboratoire m'a accordée pour la réalisation d'un appareillage "hautes pressions".

Mes remerciements s'adressent également à tous les membres du Laboratoire de Physique Expérimentale et plus particulièrement à Monsieur J. CALAS, J. CHEVRIER et A. GOUSKOV.

Je n'aurais garde d'oublier le soutien efficace qui m'a été apporté par tout le personnel technique et administratif du Laboratoire.

I N T R O D U C T I O N

Nous avons réalisé ce travail dans le cadre d'une étude concertée des propriétés de l'antimoniure de gallium faite au Centre d'Etudes d'Electronique des Solides de la Faculté des Sciences de Montpellier.

Notre but a été de mettre en évidence les possibilités et aussi les limitations de l'utilisation de mesures de piezorésistance en contrainte uniaxiale et pression hydrostatique pour l'étude de la structure de bande d'un matériau semiconducteur tel que le GaSb.

Lorsque cette étude a été entreprise, la structure de bande du GaSb était assez mal connue. Seul SAGAR⁽¹⁾ avait proposé un modèle théorique pour la bande de conduction. Ce modèle qui, dans l'ensemble, paraît encore actuellement correct, présentait un certain nombre de lacunes. Il n'en reste pas moins qu'il donnait une idée assez exacte de ce que pouvait être la structure de bande du GaSb.

Depuis de nombreux auteurs ont apporté leur contribution à la détermination de cette structure en particulier : CARDONA⁽²⁾, LIANG⁽³⁾, ROBINSON⁽⁴⁾, HARLAND et WOOLEY⁽⁵⁾, BORDURE⁽⁶⁾, PISTOULET et MATHIEU⁽⁷⁾, PISTOULET, ROBERT et BARJON⁽⁸⁾, KOSCIKI⁽⁹⁾ (10) (11), AVEROUS et BOUGNOT⁽¹²⁾ de telle sorte qu'elle est maintenant mieux connue. Il subsiste cependant

certaines points de désaccord quantitatif, en particulier, sur la masse effective de densité d'états de la bande de conduction (111), sur l'anisotropie des vallées de cette bande, sur la variation de la différence d'énergie entre les bandes de conduction (000) et (111) avec la température.

Nous avons pensé que la piezorésistance était un moyen de recherche supplémentaire pouvant contribuer à préciser ou à confirmer certains résultats tout en apportant des informations qui lui sont propres.

Le phénomène de piezorésistance est assez rarement utilisé et souvent partiellement exploité par ceux qui l'emploient, aussi nous a-t-il semblé important de proposer une théorie aussi complète que possible de la piezorésistance. Nous avons choisi pour cela un modèle à deux bandes de conduction suffisamment proches en énergie pour que l'application d'une pression hydrostatique provoque un transfert d'électrons de l'une vers l'autre. Par ailleurs pour expliquer la piezorésistance sous une contrainte uniaxiale, nous avons considéré que la bande de conduction d'énergie supérieure est multivallée conformément au modèle proposé par HERRING⁽¹³⁾, VOGT⁽¹⁴⁾, BARDEEN et SCHOCKLEY⁽¹⁵⁾.

Les dispositifs expérimentaux que nous avons réalisés nous ont permis d'obtenir les coefficients isotrope et de cisaillement du GaSb, dans un large domaine de température, ainsi que le coefficient de Hall et la conductivité.

Nous exposerons enfin la méthode de calcul autocompatible que nous avons mise au point pour déterminer à l'aide des données expérimentales et du modèle théorique choisi, certaines caractéristiques de la bande de conduction (111) du GaSb.

CH A P I T R E - II -

PHENOMENOLOGIE DE LA PIEZORESISTANCE

INTRODUCTION -

Les propriétés physiques d'un solide dépendent de son état de contrainte, c'est le cas en particulier de la résistivité. La variation de résistivité due à l'introduction d'une déformation élastique est connue sous le nom d'élastorésistance ; la variation de résistivité due à l'application d'une force est la piezorésistance.

Le tenseur des constantes élastiques définit une relation entre l'élastorésistance et la piezorésistance.

Nous utilisons le phénomène de piezorésistance pour déterminer à l'aide de mesures complémentaires telles que l'effet Hall et la résistivité, un certain nombre de paramètres de la structure électronique du GaSb de type n.

I - TENSEURS DE RESISTIVITE ET DE CONTRAINTE -

Dans l'espace à trois dimensions les tenseurs sont des grandeurs physiques qui ont un nombre de composantes égales à 3^p si p est l'ordre du tenseur.

En coordonnées cartésiennes, comme pour les vecteurs, les composantes covariantes et les composantes contravariantes sont les mêmes, et nous les utiliserons uniquement pour faire jouer la règle de sommation d'une manière convenable.

Symétrie - Antisymétrie :

Un tenseur T est symétrique si $T_{ij} = T_{ji}$

Un tenseur T est antisymétrique si $T_{ij} = -T_{ji}$

Quand un tenseur est quelconque on peut toujours le décomposer en parties symétrique et antisymétrique soit

$$T_{ij} = \frac{1}{2} (T_{ij} + T_{ji}) + \frac{1}{2} (T_{ij} - T_{ji}) = S_{ij} + A_{ij}$$

La résistivité d'un matériau se met sous la forme

$$E_i = \sum_j \rho_{ij} J_j \quad (\text{II-1})$$

$\vec{E}$ vecteur champ électrique

$\vec{J}$ vecteur densité de courant

La résistivité est donc un tenseur de rang deux.

Le tenseur de contrainte mécanique K doit vérifier sur toute surface prise dans un matériau, les relations

$$F_k = \sum_l K_{kl} N_l \quad (\text{II-2})$$

F_k est la composante sur l'axe k de la force par unité de surface

N_l est la composante du vecteur unitaire, porté par la normale extérieure, sur l'axe l

Les tenseurs ρ_{ij} et χ_{kl} sont des tenseurs symétriques, ceci indépendamment de la symétrie du cristal. Cette propriété se démontre à partir du théorème d'Onsager ⁽¹⁶⁾ basé sur le "principe de réversibilité microscopique" et qui dit que la matrice phénoménologique reliant un vecteur "flux" à un vecteur "champ" est symétrique.

Nous pouvons d'ailleurs montrer très simplement que σ_{ij} tenseur de conductivité est symétrique à l'aide d'une expérience facile :

Considérons un cristal qui possède un axe de symétrie simple d'ordre 3, 4 ou 6 le long de Ox_3 , dans un référentiel (O, x_1, x_2, x_3) et supposons que ce cristal n'ait pas d'autre symétrie.

Nous avons les relations générales

$$J_1 = \sigma_{11} E_1 + \sigma_{12} E_2 + \sigma_{13} E_3$$

$$J_2 = \sigma_{21} E_1 + \sigma_{22} E_2 + \sigma_{23} E_3 \quad (II-3)$$

$$J_3 = \sigma_{31} E_1 + \sigma_{32} E_2 + \sigma_{33} E_3$$

Nous supposons initialement que le tenseur de conductivité n'est pas symétrique ; un tel axe de symétrie réduit le tenseur non symétrique à

$$J_1 = \sigma_{11} E_1 + \sigma_{12} E_2$$

(II-4)

$$J_2 = -\sigma_{12} E_1 + \sigma_{11} E_2$$

Nous n'écrivons pas la troisième composante puisqu'elle n'intervient pas.

Considérons alors un disque circulaire taillé dans le cristal de telle sorte que Ox_3 soit normal au disque. Disposons deux électrodes l'une au centre du disque, et l'autre entourant le disque sur sa circonférence pour établir un champ radial E , à partir de l'équation II-4 on démontre que $\vec{E}$ et $\vec{J}$ font entre eux un angle constant θ , tel que $\text{tg } \theta = - \frac{\sigma_{21}}{\sigma_{11}}$ ce qui entraîne pour respecter cette condition que le courant soit spiral. Mais les expériences de VOIGT et SORET⁽¹⁶⁾ ont montré qu'un tel courant spiral n'existait pas, et par conséquent le tenseur de conductivité n'a pas de partie antisymétrique.

Donc $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

II - TENSEUR DE PIEZORESISTANCE -

Nous pouvons écrire la piezorésistance

$$\partial \rho_{ij} = \sum_{kl} \omega_{ijkl} K_{kl} \quad (\text{II-5})$$

où $\partial \rho_{ij}$ représente les variations des composantes de la résistivité résultant de l'application d'une contrainte K , lorsque la densité de courant est maintenue constante ; $\partial \rho_{ij}$ est également une matrice à six composantes indépendantes, car elle est liée aux variations des composantes de $\vec{E}$ due à l'application de K_{kl} par la relation

$$\partial E_i = \sum_{ij} \partial \rho_{ij} J_j \quad (\text{II-6})$$

On peut également appliquer le théorème d'ONSAGER à II-6 ω_{ijkl} est le tenseur de piezorésistance⁽¹⁷⁾, c'est un tenseur d'ordre quatre analogue au tenseur d'élasticité, et dans le cas général il a 3^4 composantes.

Mais compte tenu des remarques que nous avons faites sur $\partial\rho$ et sur K nous pouvons écrire l'équation II-5 sous la forme

$$\partial\rho_{\omega} = \sum_{\lambda=1}^6 \pi_{\omega\lambda} K_{\lambda} \quad (\text{II-7})$$

le tenseur de piezorésistance se réduit donc à 36 composantes indépendantes et peut être écrit en notation matricielle comme une matrice à six lignes et six colonnes.

Dans le cas d'un cristal cubique où ρ est un scalaire il est plus commode de diviser $\partial\rho_{\omega}$ par le scalaire ρ et de poser

$$\frac{\partial\rho_{\omega}}{\rho} = \Delta_{\omega} = \sum_{\lambda=1}^6 \pi_{\omega\lambda} K_{\lambda} \quad (\text{II-8})$$

C'est cette dernière définition de la piezorésistance que nous utiliserons.

$\pi_{\omega\lambda}$ décrit une propriété physique du cristal, ce qui signifie que si on lui applique les opérations de symétrie du groupe ponctuel cristallographique, il doit rester invariant.

En particulier pour les cristaux à haute symétrie cubique (432, 432, $m\bar{3}m$) si l'on prend comme axes de références (Ox_1, x_2, x_3) les trois axes du cube, une rotation de 90° autour de Ox_1 ne doit pas changer π , de même une rotation de 60° autour de la diagonale du cube (axe 111) doit conserver π .

II-1- Rotation de 90° autour de Ox_3 -

Soit Q l'opérateur appliqué à l'équation II-8

$Q\Delta = 0$ ($\pi:K$) mais Q, π sont commutables

$Q\Delta = \pi OK$

Si la matrice de rotation est α nous avons

$$\alpha \Delta \alpha^{-1} = \Pi \alpha K \alpha^{-1}$$

$$\alpha = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{la matrice transposée est } \alpha_t = \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Mais comme il s'agit d'une transformation orthogonale $\alpha_t = \alpha^{-1}$ on le montre simplement en faisant le produit $\alpha_t \alpha$ et en montrant qu'il est égal à 1.

$$\alpha \Delta = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta_1 & \Delta_4 & \Delta_5 \\ \Delta_4 & \Delta_2 & \Delta_6 \\ \Delta_5 & \Delta_6 & \Delta_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Delta_4 & \Delta_2 & \Delta_6 \\ -\Delta_1 & -\Delta_4 & -\Delta_5 \\ \Delta_5 & \Delta_6 & \Delta_3 \end{vmatrix}$$

$$\alpha \Delta \alpha^{-1} = \begin{vmatrix} \Delta_4 & \Delta_2 & \Delta_6 \\ -\Delta_1 & -\Delta_4 & -\Delta_5 \\ \Delta_5 & \Delta_6 & \Delta_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Delta_2 & -\Delta_4 & \Delta_6 \\ -\Delta_4 & \Delta_1 & -\Delta_5 \\ \Delta_6 & -\Delta_5 & \Delta_3 \end{vmatrix}$$

Donc après application de l'opérateur α , Δ et K peuvent s'exprimer comme deux **vecteurs** à six composantes :

$$\Delta = \begin{vmatrix} \Delta_2 \\ \Delta_1 \\ \Delta_3 \\ -\Delta_4 \\ \Delta_6 \\ -\Delta_5 \end{vmatrix} \quad \text{et} \quad K = \begin{vmatrix} K_2 \\ K_1 \\ K_3 \\ K_4 \\ K_6 \\ -K_5 \end{vmatrix}$$

Nous avons donc la relation

$$\begin{vmatrix} \Delta_2 \\ \Delta_1 \\ \Delta_3 \\ -\Delta_4 \\ \Delta_6 \\ -\Delta_5 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{13} & \Pi_{14} & \Pi_{15} & \Pi_{16} \\ \Pi_{21} & \Pi_{22} & \Pi_{23} & \Pi_{24} & \Pi_{25} & \Pi_{26} \\ \Pi_{31} & \Pi_{32} & \Pi_{33} & \Pi_{34} & \Pi_{35} & \Pi_{36} \\ \Pi_{41} & \Pi_{42} & \Pi_{43} & \Pi_{44} & \Pi_{45} & \Pi_{46} \\ \Pi_{51} & \Pi_{52} & \Pi_{53} & \Pi_{54} & \Pi_{55} & \Pi_{56} \\ \Pi_{61} & \Pi_{62} & \Pi_{63} & \Pi_{64} & \Pi_{65} & \Pi_{66} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} K_2 \\ K_1 \\ K_3 \\ -K_4 \\ K_5 \\ K_6 \end{vmatrix} \quad (\text{II-9})$$

Des équations (II-8) et (II-9) on tire pour chaque Δ deux expressions

$$\Delta_1 = \Pi_{11} K_1 + \Pi_{12} K_2 + \Pi_{13} K_3 + \Pi_{14} K_4 + \Pi_{15} K_5 + \Pi_{16} K_6$$

$$\Delta_1 = \Pi_{21} K_2 + \Pi_{22} K_1 + \Pi_{23} K_3 + \Pi_{24} K_4 + \Pi_{25} K_6 + \Pi_{26} K_5$$

$$\Delta_2 = \Pi_{21} K_1 + \Pi_{22} K_2 + \Pi_{23} K_3 + \Pi_{24} K_4 + \Pi_{25} K_5 + \Pi_{26} K_6$$

$$\Delta_2 = \Pi_{11} K_2 + \Pi_{12} K_1 + \Pi_{13} K_3 + \Pi_{14} K_4 + \Pi_{15} K_5 + \Pi_{16} K_6$$

$$\Delta_3 = \Pi_{31} K_1 + \Pi_{32} K_2 + \Pi_{33} K_3 + \Pi_{34} K_4 + \Pi_{35} K_5 + \Pi_{36} K_6$$

$$\Delta_3 = \Pi_{31} K_2 + \Pi_{32} K_1 + \Pi_{33} K_3 + \Pi_{34} K_4 + \Pi_{35} K_5 + \Pi_{36} K_6$$

$$\Delta_4 = \Pi_{41} K_1 + \Pi_{42} K_2 + \Pi_{43} K_3 + \Pi_{44} K_4 + \Pi_{45} K_5 + \Pi_{46} K_6$$

$$\Delta_4 = -\Pi_{41} K_2 - \Pi_{42} K_1 - \Pi_{43} K_3 + \Pi_{44} K_4 - \Pi_{45} K_5 + \Pi_{46} K_6$$

$$\Delta_5 = \Pi_{51} K_1 + \Pi_{52} K_2 + \Pi_{53} K_3 + \Pi_{54} K_4 + \Pi_{55} K_5 + \Pi_{56} K_6$$

$$\Delta_5 = -\Pi_{61} K_2 - \Pi_{62} K_1 - \Pi_{63} K_3 + \Pi_{64} K_4 - \Pi_{65} K_5 + \Pi_{66} K_6$$

$$\Delta_6 = \Pi_{61} K_1 + \Pi_{62} K_2 + \Pi_{63} K_3 + \Pi_{64} K_4 + \Pi_{65} K_5 + \Pi_{66} K_6$$

$$\Delta_6 = \Pi_{51} K_2 + \Pi_{52} K_1 + \Pi_{53} K_3 - \Pi_{54} K_4 + \Pi_{55} K_5 - \Pi_{56} K_6$$

II-2- Rotation de 60° autour de l'axe (111) -

La matrice de rotation est

$$\beta = \begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad \text{la matrice transposée est} \quad \beta_t = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\beta \Delta \beta^{-1} = \begin{vmatrix} \Delta_3 & \Delta_5 & \Delta_6 \\ \Delta_5 & \Delta_1 & \Delta_4 \\ \Delta_6 & \Delta_4 & \Delta_2 \end{vmatrix} \quad \text{et} \quad \beta K \beta^{-1} = \begin{vmatrix} K_3 & K_5 & K_6 \\ K_5 & K_1 & K_4 \\ K_6 & K_4 & K_2 \end{vmatrix}$$

Nous avons donc la relation

$$\begin{vmatrix} \Delta_3 \\ \Delta_1 \\ \Delta_2 \\ \Delta_5 \\ \Delta_6 \\ \Delta_4 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & \pi_{14} & \pi_{15} & \pi_{16} \\ \pi_{21} & \pi_{22} & \pi_{23} & \pi_{24} & \pi_{25} & \pi_{26} \\ \pi_{31} & \pi_{32} & \pi_{33} & \pi_{34} & \pi_{35} & \pi_{36} \\ \pi_{41} & \pi_{42} & \pi_{43} & \pi_{44} & \pi_{45} & \pi_{46} \\ \pi_{51} & \pi_{52} & \pi_{53} & \pi_{54} & \pi_{55} & \pi_{56} \\ \pi_{61} & \pi_{62} & \pi_{63} & \pi_{64} & \pi_{65} & \pi_{66} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} K_3 \\ K_1 \\ K_2 \\ K_5 \\ K_6 \\ K_4 \end{vmatrix} \quad (\text{II-11})$$

De l'équation II-11 on tire une nouvelle expression pour chaque Δ

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \pi_{21} K_3 + \pi_{22} K_1 + \pi_{23} K_2 + \pi_{24} K_5 + \pi_{25} K_6 + \pi_{26} K_4 \\ \Delta_2 &= \pi_{31} K_3 + \pi_{32} K_1 + \pi_{33} K_2 + \pi_{34} K_5 + \pi_{35} K_6 + \pi_{36} K_4 \\ \Delta_3 &= \pi_{11} K_3 + \pi_{12} K_1 + \pi_{13} K_2 + \pi_{14} K_5 + \pi_{15} K_6 + \pi_{16} K_4 \\ \Delta_4 &= \pi_{61} K_3 + \pi_{62} K_1 + \pi_{63} K_2 + \pi_{64} K_5 + \pi_{65} K_6 + \pi_{66} K_4 \\ \Delta_5 &= \pi_{41} K_3 + \pi_{42} K_1 + \pi_{43} K_2 + \pi_{44} K_5 + \pi_{45} K_6 + \pi_{46} K_4 \\ \Delta_6 &= \pi_{51} K_3 + \pi_{52} K_1 + \pi_{53} K_2 + \pi_{54} K_5 + \pi_{55} K_6 + \pi_{56} K_4 \end{aligned} \quad (\text{II-12})$$

A partir des équations II-10 et II-12 . Nous avons donc 3 expressions pour chaque Δ , en fonction de K_1, K_2, K_3, K_4, K_5 et K_6 .

En procédant par identification des coefficients pour chaque Δ et en éliminant les égalités incompatibles dans les différents Δ on obtient :

$$\Pi_{11} = \Pi_{22} = \Pi_{33} \qquad \Pi_{44} = \Pi_{55} = \Pi_{66}$$

$$\Pi_{12} = \Pi_{13} = \Pi_{23} = \Pi_{21} = \Pi_{31} = \Pi_{32}$$

Tous les autres termes sont nuls.

Finalement le tenseur de piezorésistance dans un système cubique se met sous la forme

$$\Pi = \begin{vmatrix} \Pi_{11} & \Pi_{12} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{11} & \Pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Pi_{12} & \Pi_{12} & \Pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Pi_{44} \end{vmatrix} \qquad (II-13)$$

Il y a seulement deux types de contraintes simples que l'on puisse appliquer à un solide.

- a) Traction ou compression uniaxiale
- b) Contrainte isotrope : pression hydrostatique

La torsion et la flexion ne font ^{pas} partie des contraintes dites simples.

III - CONTRAINTE UNIAXIALE ~

III-1- Principe de mesure de la variation de résistivité :

Considérons un échantillon de forme parallélépipédique sur lequel on exerce une force de traction $\vec{F}$ par unité de surface suivant son grand axe. Des équations II-1 et II-6 nous tirons la relation :

$$\frac{\partial E_i}{E_i} = \frac{\sum_j \rho_{ij} \frac{J_j}{J_j}}{\sum_j \rho_{ij} \frac{J_j}{J_j}}$$

Mais dans un cristal cubique ρ est un scalaire d'où

$$\left(\frac{\partial E}{E}\right)_i = \frac{1}{\rho} \sum_j \rho_{ij} u_j \quad (\text{II-14})$$

u_j représentant la composante sur l'axe j du vecteur unitaire porté par $\vec{J}$

Nous pouvons donc mesurer la variation relative de ρ en mesurant la variation relative du champ électrique $\vec{E}$ à $\vec{J}$ constant dû à l'application d'une contrainte.

Nous pouvons utiliser pour cela un des trois montages suivants :
(fig. II-1) (17)

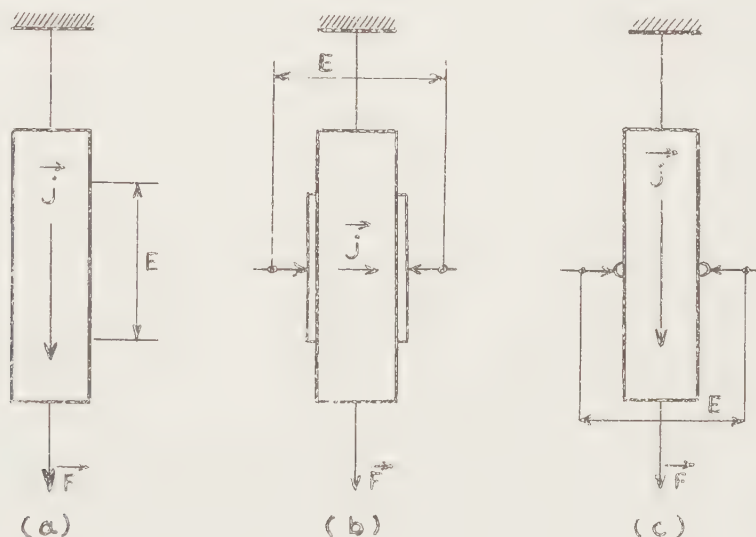


Figure - II-1 -

Le montage (a) permet une mesure longitudinale puisque $\vec{E} // \vec{F} // \vec{J}$.
C'est le montage habituellement utilisé pour des mesures de résistivité et c'est celui qui donne la meilleure détermination des constantes de piezorésistance. Malheureusement comme nous le verrons on ne peut pas déterminer l'ensemble des constantes de piezorésistance uniquement par des mesures de ce type.

Dans le montage (b) la mesure est dite transversale $\vec{E} // \vec{J} \perp \vec{F}$.
Il n'est pas aussi bon que le précédent pour plusieurs raisons :

la surface sur laquelle le courant est distribué est grande et la distance entre les prises de tension est faible, or comme nos échantillons ont une très faible résistivité, il faut un courant très important pour produire une variation de tension mesurable avec une précision suffisante

De plus, à cause du système de fixation des échantillons on ne peut pas étendre les électrodes jusqu'aux extrémités, et par conséquent on a des effets de bords dus à une distribution non uniforme du courant. Le terme de correction dû à ces effets a été calculé par H. SUKL (17) qui donne :

$$\Pi_T \approx \Pi_T (\text{obs}) + \frac{\omega}{2\pi l} (\Pi_T - \Pi_L)$$

ω épaisseur de l'échantillon

l longueur de l'échantillon

Π_T piezorésistance transversale

Π_L piezorésistance longitudinale

L'arrangement (c), $\vec{J} // \vec{F} \perp \vec{E}$, supprime la plupart des inconvénients du montage (b) mais il présente cependant un inconvénient majeur, c'est sa sensibilité à l'inhomogénéité du matériau on trouve des valeurs de Π variables suivant la localisation des prises de tensions.

Nous n'avons donc conservé parmi les montages préconisés par SMITH, que le premier, mais par contre nous ne pouvons pas déterminer toutes les constantes de piezorésistance avec des contraintes uniaxiales comme nous allons le montrer.

III-2- Lois de transformation entre les coefficients mesurés et les coefficients de piezorésistance -

L'axe de l'échantillon suivant lequel on applique la contrainte et le champ électrique n'est pas nécessairement un axe cristallographique, aussi sommes-nous obligés de fixer un nouveau référentiel qui admet comme axe principal, l'axe de l'échantillon et par des formules de transformation de relier le coefficient mesuré à Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} qui sont les coefficients par rapport aux axes cristallographiques.

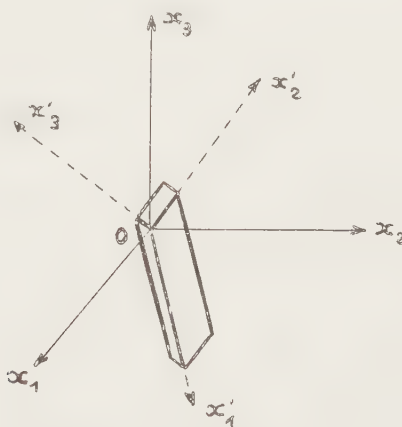


Figure - II-2 -

III-2-1- Transformation des axes de référence -

On passe d'un système d'axe ox_1, x_2, x_3 à un système d'axes ayant même origine ($0x'_1, x'_2, x'_3$) par la tableau de cosinus directeurs II-15

	x_1	x_2	x_3	
x'_1	a_{11}	a_{12}	a_{13}	
x'_2	a_{21}	a_{22}	a_{23}	(II-15)
x'_3	a_{31}	a_{32}	a_{33}	

Les cosinus directeurs de x'_2 par rapport à x_1, x_2, x_3 sont a_{21}, a_{22}, a_{23}

a_{ij} est le cosinus de l'angle entre x'_i et x_j , le premier indice se rapportant aux nouveaux axes.

III-2-2- Transformation des composantes d'un tenseur -

1) Soit un vecteur $\vec{p}$ de composantes p_1, p_2, p_3 dans le premier système d'axes ; si p'_1, p'_2, p'_3 sont ses composantes dans le deuxième système d'axes, on a : $p'_1 = a_{11} p_1 + a_{21} p_2 + a_{31} p_3$

Soit d'une manière générale :

$$p'_i = \sum_j a_{ij} p_j \quad (\text{II-16})$$

expression des nouvelles composantes en fonction des anciennes.

2) Le tenseur liant deux vecteurs p et q , dans un même système d'axes étant défini par :

$$p_i = \sum_j T_{ij} q_j$$

Les valeurs T_{ij} dépendent du système d'axes choisi (Ox_1, x_2, x_3)

Dans le nouveau système d'axes (Ox'_1, x'_2, x'_3) lié au précédent par le tableau II-15, les vecteurs p et q ont pour composantes p'_i et q'_j . Pour trouver les relations qui existent entre ces nouvelles composantes utilisons la série des équations suivantes :

$$p' \rightarrow p \rightarrow q \rightarrow q'$$

$$p'_i = \sum_k a_{ik} p_k \quad p_k = \sum_l T_{kl} q_l \quad q_l = \sum_j a_{jl} q'_j$$

Donc
$$p'_i = \sum_{k,l,j} a_{ik} T_{kl} a_{jl} q'_j$$

Or dans le nouveau système d'axes

$$p'_i = \sum_j T'_{ij} q'_j$$

où T'_{ij} est le coefficient de q'_j dans la ième expression

Donc
$$T'_{ij} = \sum_{kl} a_{ik} a_{jl} T_{kl} \quad \text{(II-17)}$$

k, l indices muets

i et j indices libres

Développons par rapport à l

$$T'_{ij} = \sum_k a_{ik} a_{j1} T_{k1} + a_{ik} a_{j2} T_{k2} + a_{ik} a_{j3} T_{k3}$$

k est maintenant un indice muet dans chaque terme.

Développons par rapport à k :

$$\begin{aligned}
 T'_{ij} = & a_{i1} a_{j1} T_{11} + a_{i1} a_{j2} T_{12} + a_{i1} a_{j3} T_{13} \\
 & + a_{i2} a_{j1} T_{21} + a_{i2} a_{j2} T_{22} + a_{i2} a_{j3} T_{23} \\
 & + a_{i3} a_{j1} T_{31} + a_{i3} a_{j2} T_{32} + a_{i3} a_{j3} T_{33}
 \end{aligned}
 \tag{II-18}$$

A chaque groupe de valeur de i et j correspond une équation de ce type. Pour des tenseurs de rang trois et de rang quatre, nous procéderions de la même façon.

On peut donc donner le tableau suivant :

Rang du tenseur	Lois de transformation	
	Nouveaux termes en fonction des anciens	Anciens termes en fonction des nouveaux
0 (scalaire)	$\varphi' = \varphi$	$\varphi = \varphi'$
1 (vecteur)	$p'_i = a_{ij} p_j$	$p_i = a_{ji} p'_j$
2	$T'_{ij} = a_{ik} a_{jl} T_{kl}$	$T_{ij} = a_{ki} a_{lj} T'_{kl}$
3	$T'_{ijk} = a_{il} a_{jm} a_{kn} T_{lmn}$	$T_{ijk} = a_{li} a_{mj} a_{nk} T'_{lmn}$
4	$T'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{jp} T_{mnop}$	$T_{ijkl} = a_{mi} a_{ok} a_{pl} T'_{mnop}$

III-2-3- Application au tenseur de piezorésistance -

Si nous prenons un système d'axes tels que l'axe de l'échantillon coïncide avec Ox'_1 , c'est à dire tel que $\vec{E}$, $\vec{J}$ et $\vec{F}$ soient parallèles à Ox'_1 , le coefficient mesuré en notation complétée est Π'_{1111} ou Π'_{11} en notation condensée. (équation II-8).

Exprimons Π'_{1111} en fonction Π_{1111} , Π_{1112} et Π_{1212} c'est à dire en fonction de Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} .

$$\Pi'_{1111} = a_{1m} a_{1n} a_{10} a_{1p} \Pi_{mnop}$$

On trouve tous calculs faits que :

$$\Pi'_{1111} = \Pi_{11}(a_{11}^4 + a_{12}^4 + a_{13}^4) + (\Pi_{12} + \Pi_{44}) 2(a_{11}^2 a_{13}^2 + a_{11}^2 a_{12}^2 + a_{12}^2 a_{13}^2)$$

$$\Pi'_{1111} = \Pi_{11}(a_{11}^4 + a_{12}^4 + a_{13}^4) + (\Pi_{12} + \Pi_{44})[a_{11}^2(a_{13}^2 + a_{12}^2) + a_{12}^2(a_{13}^2 + a_{11}^2) + a_{13}^2(a_{12}^2 + a_{11}^2)]$$

(II-19)

D'autre part comme $a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2 = 1$:

$$a_{13}^2 + a_{12}^2 = 1 - a_{11}^2$$

$$a_{13}^2 + a_{11}^2 = 1 - a_{12}^2$$

$$a_{12}^2 + a_{11}^2 = 1 - a_{13}^2$$

L'équation II-19 devient :

$$\Pi'_{1111} = \Pi_{11}(a_{11}^4 + a_{12}^4 + a_{13}^4) + (\Pi_{12} + \Pi_{44})(-a_{11}^4 - a_{12}^4 - a_{13}^4) + (\Pi_{12} + \Pi_{44})(a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{13}^2)$$

Le dernier terme est égal à $\Pi_{12} + \Pi_{44}$ et Π'_{1111} peut se mettre sous la forme définitive :

$$\Pi'_{1111} = (\Pi_{11} - \Pi_{12} - \Pi_{44})(a_{11}^4 + a_{12}^4 + a_{13}^4) + \Pi_{12} + \Pi_{44} \quad (\text{II-20})$$

Nous avons travaillé sur des échantillons ayant les directions $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 110 \rangle$.

Pour la direction $\langle 100 \rangle$

les deux référentiels coïncident

$$a_{11} = 1 \quad a_{12} = 0 \quad a_{13} = 0$$

$$\text{Donc } \Pi'_{1111} = \Pi_{1111} = \Pi_{11} \quad \text{donc dans ce cas } \frac{1}{F} \frac{\partial \rho}{\partial \rho} = \Pi_{11} \quad (\text{II-21})$$

Pour la direction $\langle 111 \rangle$

$$a_{11} = a_{12} = a_{13} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\text{Donc } \Pi'_{1111} = \frac{1}{3} (\Pi_{11} + 2\Pi_{12} + 2\Pi_{44}) \quad \text{dans ce cas } \frac{1}{F} \frac{\partial \rho}{\partial \rho} = \frac{1}{3} (\Pi_{11} + 2\Pi_{12} + 2\Pi_{44}) \quad (\text{II-22})$$

Pour la direction $\langle 110 \rangle$

$$a_{11} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad a_{12} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad a_{13} = 0 \quad \text{donc}$$

$$\frac{1}{F} \frac{\partial \rho}{\partial \rho} = \frac{1}{2} (\Pi_{11} + \Pi_{12} + \Pi_{44}) \quad (\text{II-23})$$

Nous voyons que ces trois types de mesures ne sont pas suffisants pour déterminer les trois coefficients de piezorésistance car les équations ne sont pas indépendantes, aussi nous avons fait également des mesures sous pression hydrostatique.

IV - CONTRAINTES ISOTROPE - (PRESSION HYDROSTATIQUE)

Un échantillon soumis à une variation de pression hydrostatique conserve la même symétrie cristalline, à condition que la pression soit suffisamment faible pour ne pas changer la structure du cristal ou sa compacité.

Considérons un échantillon de forme parallélépipédique dont 3 arêtes constituent les axes du référentiel (figure II-3).

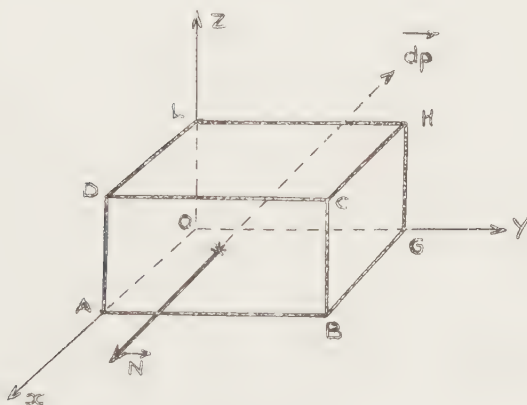


Figure - II-3 -

Soit $\vec{N}$ la normale extérieure à la face ABCD.

Sur cette face, le tenseur de contrainte doit vérifier la relation :

$$\vec{F} = K_0 \cdot \vec{N}$$

Ici la force exercée par unité de surface est $-dp$ (pression appliquée - p_0 : pression atmosphérique).

Nous avons donc :

$$K_{xx} = K_1 = -dp$$

$$K_{xy} = K_4 = 0$$

$$K_{xz} = K_5 = 0$$

Nous aurons les mêmes relations sur les faces BCHG et LDCH
D'où nous tirons

$$K_{yy} = K_2 = -dp \quad K_{zz} = K_3 = -dp$$

$$K_{yz} = K_6 = 0$$

Donc K peut se mettre sous la forme

$$K = \begin{vmatrix} -dP & 0 & 0 \\ 0 & -dP & 0 \\ 0 & 0 & -dP \end{vmatrix} = -dP \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = -dP \cdot 1$$

où 1 est le tenseur unité.

Sous l'effet d'une pression hydrostatique seuls les termes diagonaux de ρ pourront varier de telle sorte que Δ_ω sera diagonal.

$$\Delta_\omega = \Delta \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{\partial \rho}{\partial P} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

On obtient à partir de l'équation

$$\Delta_\omega = \sum_{\lambda} \Pi_{\omega\lambda} K$$

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P} = \Pi_{11} + 2\Pi_{12}$$

CONCLUSION

Ainsi à partir de mesures sous contraintes uniaxiales et de mesures sous pression hydrostatique, nous pouvons déterminer l'ensemble des coefficients de piezorésistance d'un matériau. Ce sont ces coefficients que nous nous attacherons dans l'étude théorique à relier aux paramètres de la structure de bande.

CHAPITRE - III -

I - MODELE MULTIVALLEE -

Le modèle simple suppose un seul état quantique de chaque spin pour l'énergie minimum de la bande, avec un vecteur d'onde $\vec{K} = 0$ et des surfaces d'énergies constantes sphériques. Un tel modèle ne peut convenir pour expliquer les résultats obtenus sur l'antimoniure de gallium de type n par des mesures de piezoréssitance et de magnétorésistance.

Aussi fut-on obligé très tôt de supposer en plus de la bande de conduction sphérique centrée en $K = 0$, l'existence d'une autre bande pour laquelle il peut exister plus d'un état quantique possible avec l'énergie du bas de la bande. Ceci nous amène à proposer les trois modèles suivants.

I-1- Multivallée simple : C'est un modèle pour lequel l'énergie du bas de la bande se présente pour plusieurs vecteurs d'ondes $\vec{K}^{(i)}$ bien déterminés,

mais pour chaque $K^{(i)}$ il n'y a qu'un état de chaque spin ayant cette énergie. L'énergie, considérée comme une fonction de K présente donc un certain nombre de minima appelés vallées. Les surfaces d'énergie constante sont alors des ellipsoïdes centrés sur les points $K^{(i)}$, du bord de la bande. L'énergie varie d'une manière continue et différentielle avec K et passe par un minimum à $K^{(i)}$.

La figure III-1 représente un tel modèle avec les vallées prises par exemple le long des axes d'ordre 4

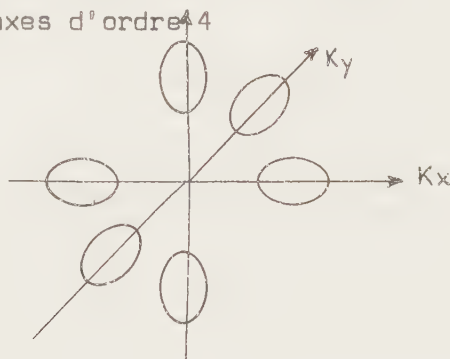


Fig: III-1

I-2- Modèle à une vallée dégénérée : On peut avoir deux ou plusieurs états ayant l'énergie du bord de la bande et le même vecteur d'onde

$\vec{K} = 0$: Fig. III-2-

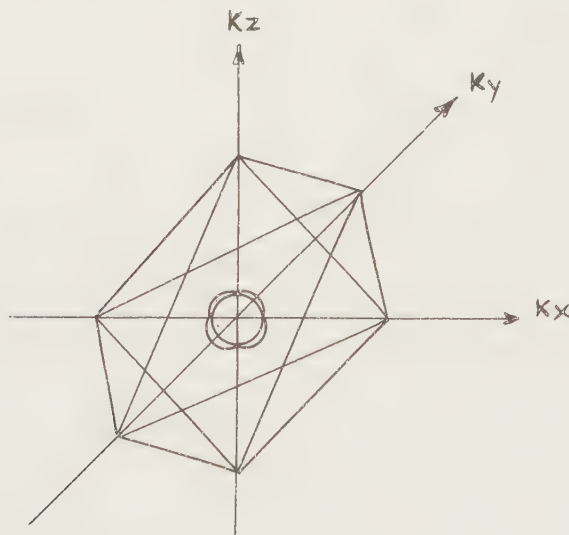


Figure III-2

I-3- Modèle multivallées dégénérées -

On peut avoir la même énergie pour plusieurs vecteurs d'ondes $\vec{K}^{(i)}$, mais pour chaque $\vec{K}^{(i)}$, il peut y avoir plusieurs états de chaque spin ayant cette énergie.

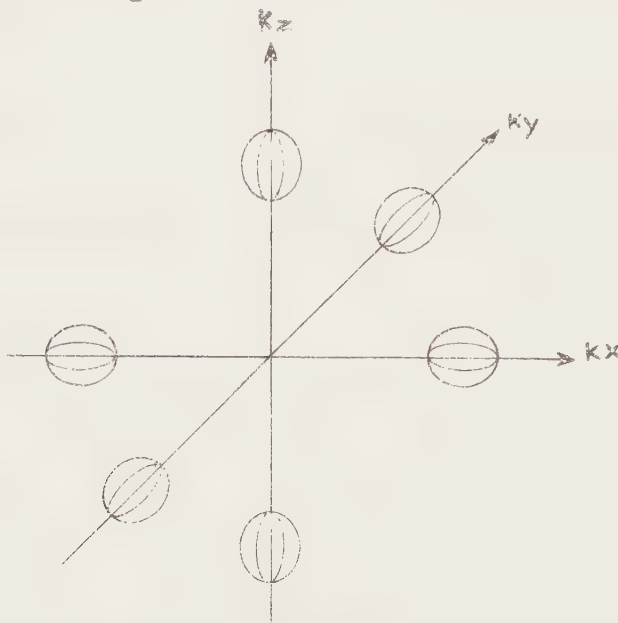


Figure III-3

Les cas I-2 et I-3 sont extrêmement compliqués à traiter théoriquement, car d'une part la variation de l'énergie avec K n'est pas simple, et d'autre part les énergies de plusieurs états associés au bord de la bande sont éclatés par le couplage spin orbite.

Heureusement, il semble que le modèle multivallée simple convienne parfaitement pour le GaSb de type n .

On rappelle que dans le cas d'une bande multivallée pour la i ème vallée

$$E(K) = E_b + \frac{\hbar^2}{2} \frac{(K_1)^2}{m_1} + \frac{(K_2)^2}{m_2} + \frac{(K_3)^2}{m_3}$$

avec

$$\vec{K} = \vec{K} - \vec{K}^{(i)}$$

et $E_b = E(K^{(1)}) =$ énergie minimale de la vallée

Pour des surfaces d'énergie constante ellipsoïdales

$$m_1^* = m_{\parallel}^* = \text{masse longitudinale}$$

et $m_2^* = m_3^* = m_{\perp}^*$ masse transversale

On peut transformer les surfaces d'énergie constante ellipsoïdales en sphères, en choisissant de nouveaux axes de coordonnées sur les trois directions principales de la vallée avec une nouvelle échelle telle que :

$$\phi_1 = \frac{\hbar \Delta K_1}{m_1^*{}^{1/2}} = v_1 m_1^*{}^{1/2} \quad \phi_2 = \frac{\hbar \Delta K_2}{m_2^*{}^{1/2}} = v_2 m_2^*{}^{1/2}$$

$$\phi_3 = \frac{\hbar \Delta K_3}{m_3^*{}^{1/2}} = v_3 m_3^*{}^{1/2}$$

$$E(K) = E(K^{(1)}) = \Delta E(K) = \sum_{\alpha} \frac{1}{2} \phi_{\alpha}^2$$

Dans ce nouvel espace :

$\frac{1}{2} m_{\alpha}^* v_{\alpha}^2$ est la moyenne de ϕ_{α}^2 qui est indépendant de α sur une surface sphérique.

Donc $\frac{1}{2} m_{\alpha}^* v_{\alpha}^2$ est indépendant de α , nous en tirons donc

$$m_1^* v_1^2 = m_2^* v_2^2 = m_3^* v_3^2$$

II - POTENTIEL DE DEFORMATION -

II-1- Définition -

Si l'on applique une contrainte quelconque à un matériau, cette contrainte introduit des déformations locales qui se traduisent par des déplacements des atomes du réseau. Les déplacements vont perturber le potentiel auquel sont soumis les électrons et par suite modifier l'énergie de ces derniers.

Le concept du potentiel de déformation a pour but de relier la variation de l'énergie d'un électron de K donné à la déformation qui l'a provoquée. Compte tenu de la répartition des électrons dans des vallées, on admet en première approximation que l'énergie de tous les électrons d'une même vallée est affectée de la même façon, il suffit alors de relier la variation de l'énergie minimale de la vallée à la déformation.

Nous allons par conséquent définir la déformation:

nous imaginons que trois vecteurs orthogonaux de longueur unité $\vec{f}$, $\vec{g}$, $\vec{h}$ sont placés d'une manière bien déterminée dans le solide non déformé ;
fig. III-3.

Nous supposons qu'à la suite d'une petite déformation, les vecteurs que nous appellerons maintenant $\vec{f}^0$, $\vec{g}^0$, $\vec{h}^0$ sont distordus en orientation et en longueur de sorte que nous pouvons écrire, en prenant le même atome comme origine

$$\vec{f}^0 = (1 + \epsilon_{xx})\vec{f} + \epsilon_{xy}\vec{g} + \epsilon_{xz}\vec{h}$$

$$\vec{g}^0 = \epsilon_{yx}\vec{f} + (1 + \epsilon_{yy})\vec{g} + \epsilon_{yz}\vec{h}$$

$$\vec{h}^0 = \epsilon_{zx}\vec{f} + \epsilon_{zy}\vec{g} + (1 + \epsilon_{zz})\vec{h}$$



Figure III-4

Au premier ordre près, la variation relative de la longueur de f , g , h est respectivement : ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} . Nous définissons les composantes de la déformation longitudinale e_{xx} , e_{yy} , e_{zz} par les relations :

$$e_{xx} = \epsilon_{xx} \quad e_{yy} = \epsilon_{yy} \quad e_{zz} = \epsilon_{zz}$$

Les composantes e_{xy} , e_{yz} , e_{zx} de la déformation peuvent être définies comme étant les variations des angles, soit, au premier ordre près :

$$e_{xy} = \vec{f}^0 \cdot \vec{g}^0 = \epsilon_{yx} + \epsilon_{xy}$$

$$e_{yz} = \vec{g}^0 \cdot \vec{h}^0 = \epsilon_{zy} + \epsilon_{yz}$$

$$e_{zx} = \vec{h}^0 \cdot \vec{f}^0 = \epsilon_{zx} + \epsilon_{xz}$$

Nous remarquons qu'une simple rotation des axes ne modifie pas les angles entre ces axes, de sorte que, pour une rotation pure, nous avons

$$\epsilon_{yz} = -\epsilon_{xy}, \quad \epsilon_{zy} = -\epsilon_{yx}, \quad \epsilon_{zx} = -\epsilon_{xz}$$

En excluant le cas de la rotation pure qui n'offre aucun intérêt nous pouvons prendre, sans réduire la généralité ⁽¹⁸⁾

$$\epsilon_{yx} = \epsilon_{xy}, \quad \epsilon_{zy} = \epsilon_{yz}, \quad \epsilon_{zx} = \epsilon_{xz}$$

$$\text{D'où} \quad e_{xy} = 2\epsilon_{xy} \quad e_{yz} = 2\epsilon_{yz} \quad e_{zx} = 2\epsilon_{zx}$$

d'où les expressions des composantes de la déformation

$$\vec{f}^0 - \vec{f} = e_{xx} \vec{f} + \frac{1}{2} e_{xy} \vec{g} + \frac{1}{2} e_{zx} \vec{h}$$

$$\vec{g}^0 - \vec{g} = \frac{1}{2} e_{xy} \vec{f} + e_{yy} \vec{g} + \frac{1}{2} e_{yz} \vec{h}$$

$$\vec{h}^0 - \vec{h} = \frac{1}{2} e_{zx} \vec{f} + \frac{1}{2} e_{yz} \vec{g} + e_{zz} \vec{h}$$

Considérons une déformation sensiblement uniforme au voisinage de l'origine ; une particule initialement à la position :

$$\vec{r} = x\vec{f} + y\vec{g} + z\vec{h}$$

occupe après la déformation, la position

$$\vec{r}^0 = x\vec{f}^0 + y\vec{g}^0 + z\vec{h}^0$$

Le déplacement est donné par

$$\vec{r}' - \vec{r} = x(\vec{f}' - \vec{f}) + y(\vec{g}' - \vec{g}) + z(\vec{h}' - \vec{h})$$

Si nous écrivons le déplacement sous la forme

$$\vec{r}' - \vec{r} = u\vec{f} + v\vec{g} + w\vec{h}$$

Nous avons les expressions suivantes pour les composantes de la déformation

$$e_{xx} = \epsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}$$

$$e_{yy} = \epsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y}$$

$$e_{zz} = \epsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$e_{xy} = 2\epsilon_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}$$

$$e_{yz} = 2\epsilon_{yz} = \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}$$

$$e_{zx} = 2\epsilon_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}$$

Nous les avons écrites sous forme de différentielles pour le cas d'une déformation non uniforme.

Dans le cas d'une déformation uniforme, les composantes du déplacement sont :

$$u = \epsilon_{xx} x + \epsilon_{xy} y + \epsilon_{xz} z$$

$$v = \epsilon_{yx} x + \epsilon_{yy} y + \epsilon_{yz} z$$

$$w = \epsilon_{zx} x + \epsilon_{zy} y + \epsilon_{zz} z$$

Dans le cas d'une dilatation, l'accroissement relatif du volume, est appelé dilatation. Le cube unité d'arêtes f, g, h a un volume après la déformation

$$V' = (\vec{f}', \vec{g}', \vec{h}') \approx 1 + \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$$

où l'on a négligé les carrés et produits des composantes de la déformation

La dilatation est donc

$$\frac{\Delta V}{V'} = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}$$

Dans le cas d'une déformation due au cisaillement, les composantes de la déformation

$$e_{xy} = 2\epsilon_{xy} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \quad \text{sont le résultat de deux cisaillements.}$$

Sous l'effet du premier cisaillement, les plans du corps normaux à l'axe x glissent dans la direction y , au cours du deuxième cisaillement, les plans normaux à l'axe y glissent dans la direction x .

Nous avons défini la déformation, par e_{ij} où d'une manière équivalente par ϵ_{ij} avec les relations

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij} &= e_{ij} & \text{si} & \quad i = j \\ 2\epsilon_{ij} &= e_{ij} & \text{si} & \quad i \neq j \end{aligned}$$

Dans la suite de notre travail nous adopterons pour les composantes de la déformation ϵ_{ij}

Nous voulons relier la variation de l'énergie minimale de la vallée à la déformation.

Si l'on désigne alors par $E_0(K^{(i)})$, l'énergie minimale de la vallée en l'absence de déformation, les composantes E_λ du potentiel de déformation sont définies par :

$$\partial E^{(i)} = E(K^{(i)}) - E_0(K^{(i)}) = \sum_{\lambda=1}^6 E_\lambda^i \cdot \epsilon_\lambda$$

En adoptant pour ϵ_{ij} la notation condensée, que nous avons déjà employée pour la résistivité et la contrainte dans le chapitre II,

Pour des vallées situées suivant des axes d'ordre 3 ou d'ordre 4 de cristaux à symétrie cubique, les composantes E_λ^i peuvent s'exprimer en fonction de deux constantes E_D et E_U qui sont définies de la manière suivante :

- Une dilatation dans deux directions normales à l'axe d'une vallée donnée, caractérisée par conséquent par rapport à un trièdre lié à cet axe par un tenseur de déformation tel que

$$\epsilon_1 = \epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 0, \quad \epsilon_2 = \epsilon_3 = \frac{\epsilon}{2}$$

produit une variation d'énergie :

$$\partial E^{(i)} = E_D^{(i)} \epsilon$$

- un cisaillement formé d'un allongement dans la direction de l'axe de la vallée et d'une contraction dans deux directions perpendiculaires et par conséquent caractérisé par :

$$\epsilon_1 = \epsilon \quad \epsilon_2 = \epsilon_3 = -\frac{\epsilon}{2} \quad \epsilon_4 = \epsilon_5 = \epsilon_6 = 0$$

produit une variation d'énergie

$$\partial E^i = E_U^i \epsilon$$

On montre alors que d'une manière générale

$$\varepsilon_{\lambda}^i = \frac{\partial E^i}{\partial \varepsilon_{\lambda}} = \frac{\partial E^i}{\partial \varepsilon_{ij}} = \varepsilon_d^i \delta_{ij} + \varepsilon_u^i \frac{K_{ij}^{(d)} K_{ij}^{(u)}}{K^{(d)2}}$$

pour des vallées suivant des axes d'ordre 3 ou 4 ;

δ_{ij} est le symbole de Kronecker et K_{ij}^i , K_{ij}^j sont les composantes de K^i

Par exemple pour une vallée dont l'axe est dans la direction $\langle 100 \rangle$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_d + \varepsilon_u$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_d$$

$$\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0$$

et pour une vallée dont l'axe est dans la direction $\langle 111 \rangle$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \varepsilon_d + \frac{1}{3} \varepsilon_u$$

$$\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = \frac{1}{3} \varepsilon_u$$

Remarquons que les constantes d'une vallée j s'obtiennent en appliquant aux constantes de la vallée i des opérations de symétrie ; on peut dans ce qui suit omettre l'exposant i en se rappelant toutefois qu'on ne s'intéresse qu'à une vallée bien déterminée. De la même façon, l'énergie $E_0(K)$ d'un électron sous l'action d'une déformation caractérisée par le tenseur ε_{ij} devient $E(K, \varepsilon_{ij})$ telle que :

$$E(K, \epsilon_{ij}) - E_0(K) = \sum_{ij} \epsilon_{ij} E_{ij}(K)$$

Si K est petit et pour un cristal cubique, $E_{ij}(K)$ peut être développé en série

$$E_{ij}(K) = E_1 \delta_{ij} + \sum_{\gamma} \beta_{ij\gamma} K_{\gamma} K_{\gamma} + \dots$$

et par suite

$$E(K, \epsilon_{ij}) - E_0(K) = \sum_{ij} \epsilon_{ij} E_1 \delta_{ij} + \text{des termes en } K^2 + \dots$$

les termes d'ordre supérieur ou égal à deux en K peuvent être négligés pour K petit et par suite, on peut écrire :

$$E(K, \epsilon_{ij}) - E_0(K) = E_1 \Delta$$

où Δ est la dilatation du cristal

E_1 est donc également un potentiel de déformation et $E_1 \Delta$ représente la perturbation introduite par la déformation.

II-2- Théorie du potentiel de déformation -

Le concept de potentiel de déformation est intéressant car il permet d'étudier d'une manière relativement simple le phénomène de diffusion intravallée des électrons par les modes acoustiques de vibration du réseau et la variation de population des bandes de conduction sous l'application d'une contrainte

BARDEEN et SHOCKLEY (15) ont en effet montré que le potentiel de déformation s'introduit dans le calcul de la fonction d'onde d'un électron dans un cristal perturbé par une déformation de la même façon que le potentiel électrostatique dans le cas d'un cristal soumis à un champ électrique appliqué. Dans ce dernier cas en effet, il est possible de décrire le

mouvement des électrons en négligeant le potentiel périodique du réseau pour ne tenir compte que du potentiel électrostatique variant progressivement dans le cristal et dû au champ appliqué, mais à condition d'attribuer aux électrons une masse appropriée⁽¹⁹⁻²⁰⁾, la masse effective. De même pour un cristal déformé, on ne fera intervenir que le potentiel de déformation avec la masse effective.

On écrira par conséquent que la fonction d'onde $\psi_d(\vec{r})$ d'un électron de vecteur position $\vec{r}$ dans le cristal déformé doit vérifier l'équation d'onde :

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E(p, \epsilon_{ij}) - U_d(\vec{r}) \right] \psi_d(\vec{r}) = 0 \quad \text{III-II-1}$$

où $U_d(\vec{r})$ est le potentiel du cristal déformé
Nous avons

$$U_d(\vec{r}) = U_0(\vec{r} - \vec{\partial R}) + U_1(r, \epsilon_{ij})$$

avec $U_0(\vec{r})$ est le potentiel périodique du cristal non déformé pour la position $\vec{r}$

$\vec{\partial R}$ est le déplacement dû à la déformation

U_1 dépend de la position r et des composantes de la déformation.

Pour de petites déformations U_1 varie linéairement avec la déformation.
L'équation d'onde devient donc

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E(p, \epsilon_{ij}) - U_0(\vec{r} - \vec{\partial R}) - U_1(r, \epsilon_{ij}) \right] \psi_d(r) = 0 \quad \text{III-II-2}$$

Nous pouvons obtenir une solution approchée de ψ_d en fonction des fonctions d'onde exactes des électrons dans un cristal soumis à une déformation homogène ($\vec{\partial R}$ fonction linéaire de la position).

L'équation d'onde dans le cas d'une déformation homogène pour un électron est alors

$$\left[\hbar^2/2m \nabla^2 + E_{\text{hom}}(P, \epsilon_{ij}) - U_0(\vec{r} - \partial \vec{R}) - U_1(r, \epsilon_{ij}) \right] \psi_{\text{hom}}(r, \epsilon_{ij}, P) = 0$$

III-II-3

où E_{hom} est de la forme :

$$E_h(P, \epsilon_{ij}) = E_{ho}(\epsilon_{ij}) + \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_\alpha P_\beta$$

les coefficients $\alpha_{\alpha\beta}$ dépendent de la masse effective dans le cristal déformé

La fonction ψ_h est de la forme

$$\psi_h(r, \epsilon, P) = \exp \frac{i \vec{P} \cdot \vec{r}}{\hbar} u_h(r - \partial R, \epsilon, P)$$

Si $\vec{P}$ est petit devant le côté de la zone de Brillouin, u_h peut être développé en série

$$u_h(r - \partial R, \epsilon, P) = u_{ho}(r - \partial R, \epsilon) + P \cdot \nabla_P u_h(r - \partial R, \epsilon) + \dots$$

Nous allons montrer que l'on peut obtenir une expression approchée de Ψ_d par l'utilisation du concept de masse effective : l'équation d'onde qui est utilisée dans la méthode de la masse effective ⁽¹⁵⁾ est de la forme :

$$\left[\hbar^2 \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} \partial^2 / (\partial x_\alpha \partial x_\beta) + E - E_{ho}(\epsilon) \right] A(r) = 0 \quad \text{III-II-4}$$

Cette équation s'applique à un électron, ayant une masse effective donnée par le tenseur $\alpha_{\alpha\beta}$, se déplaçant dans le potentiel effectif $E_{ho}(\epsilon)$ (potentiel de déformation).

Supposons qu'une solution de cette équation se mette sous la forme d'une série de FOURIER.

$$A(r) = \sum_P a(P) \exp \frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}$$

$$\frac{\partial A(r)}{\partial x_\beta} = \sum_P a(P) \frac{iP_\beta}{\hbar} e^{\frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}}$$

$$\frac{\partial^2 A(r)}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = \sum_P a(P) \frac{iP_\beta}{\hbar} \frac{iP_\alpha}{\hbar} e^{\frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}}$$

L'équation III-4 devient

$$-\hbar^2 \sum_\beta \alpha_{\beta\beta} \sum_P a(P) \frac{P_\beta P_\beta}{\hbar^2} e^{\frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}} + [E - E_{ho}(\epsilon)] \sum_P a(P) e^{\frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}} = 0$$

$$\sum_P a(P) \left[- \sum_\beta \alpha_{\beta\beta} P_\beta P_\beta + E - E_{ho}(\epsilon) \right] e^{\frac{i\vec{P}_0 \cdot \vec{r}}{\hbar}} = 0 \quad \text{III-II-5}$$

Posons $\psi_d = \sum_P a(P) \psi_h(r, \epsilon, P)$ et montrons que cette expression de ψ_d est une solution approchée de III-II-2

Si nous faisons $\sum_P a(P)$ sur l'équation III-II-3 nous obtenons :

$$\sum_P \frac{\hbar^2}{2m} a(P) \nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) + \sum_P a(P) E_h(P, \epsilon) \psi_h(r, \epsilon, P) - U_0(r - \partial R) + u_1(r, \epsilon) \psi_d = 0$$

III-II-6

Si nous soustrayons III-II-6 de III-II-2 nous obtenons :

$$\sum_P \frac{\hbar^2}{2m} a(P) \nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) + \sum_P a(P) E_h(P, \epsilon) \psi_h(r, \epsilon, P) - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E \right] \sum_P a(P) \psi_h(r, \epsilon, P) = 0$$

III-II-7

Remplaçons $E_h(P, \epsilon)$ par $E_{ho}(\epsilon) + \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta}$ III-II-7 devient :

$$\sum_P \frac{\hbar^2}{2m} a(P) \nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) + \sum_P a(P) \left[E_{ho}(\epsilon) + \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta} \right] \psi_h(r, \epsilon, P) - \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E \right] \sum_P a(P) \psi_h(r, \epsilon, P) = 0$$

III-II-8

que nous pouvons écrire sous la forme :

$$\sum_P a(P) \left[E - E_{ho}(\epsilon) - \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta} \right] \psi_h(r, \epsilon, P) = \sum_P \frac{\hbar^2}{2m} a(P) \nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_P \nabla^2 a(P) \psi_h(r, \epsilon, P)$$

$$\sum_P a(P) \left[E - E_{ho}(\epsilon) - \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta} \right] \psi_h(r, \epsilon, P) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_P a(P) \left[\nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) - \nabla^2 \psi_h(r, \epsilon, P) \right]$$

III-II-9

Le deuxième membre de l'équation III-II-9 est identiquement nul, il nous reste à montrer que le premier membre est effectivement nul.

$$\sum_P a(P) \left[E - E_{ho}(\epsilon) - \sum_{\alpha\beta} \alpha_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta} \right] \psi_h(r, \epsilon, P) = 0$$

III-II-10

ψ_h est de la forme

$$\psi_h = e^{\frac{i \vec{P} \cdot \vec{r}}{\hbar}} u_h(r, \epsilon, P)$$

Nous avons vu que :

$$u_h(r-\partial R, \epsilon, P) \approx u_{ho}(r-\partial R, \epsilon) + \vec{P} \left[\vec{\nabla}_P u_h(r-\partial R, \epsilon, P) \right]_{P=0} + \dots$$

Donc III-II-10 devient

$$\sum_P a(P) \left[E - E_{ho}(\epsilon) - \sum_{\beta} \alpha_{\beta} P_{\beta} P_{\beta} \right] e^{\frac{i \cdot \vec{P} \cdot \vec{r}}{\hbar}} \left[u_{ho}(r-\partial h, \epsilon) + \dots \right]$$

Or nous avons montré dans l'équation III-II-5

$$\sum_P a(P) \left[- \sum_{\beta} \alpha_{\beta} P_{\beta} P_{\beta} + E - E_{ho}(\epsilon) \right] e^{\frac{i \cdot \vec{P} \cdot \vec{r}}{\hbar}} = 0$$

Ce qui entraîne bien l'identité III-II-10 à l'ordre le plus bas

Donc $\psi_d = \sum_P a(P) \psi_h(r, \epsilon, P)$ est bien une solution approchée de III-II-1

III- PROCESSUS DE DIFFUSION DES ELECTRONS -

Les processus de diffusion subis par les porteurs sont essentiellement caractérisés par une probabilité par unité de temps de transition entre un état initial K et un état final situé dans l'unité de volume dans l'espace des K, centrée sur K' par le processus envisagé : S(K, K').

Dans un premier temps nous rappellerons qu'à chaque processus on peut associer un temps de relaxation et dans un deuxième temps nous établirons une distinction entre les processus pour lesquels le temps de relaxation dépend uniquement de l'énergie et ceux pour lesquels cette hypothèse n'est pas acceptable. Nous utiliserons la statistique de Maxwell et nous montrerons comment étendre les résultats obtenus à la statistique de Fermi-Dirac.

III-1- Définition du temps de relaxation -

Si f est la fonction de distribution des vecteurs d'ondes l'équation de Boltzmann en statistique de Maxwell est de la forme, à température homogène :

$$\frac{\partial f(K)}{\partial t} = \left[\frac{\partial f(K)}{\partial t} \right]_{\text{champ}} + \int_{K'} \left[f(K') S(K', K) - f(K) S(K, K') \right] dK'$$

III-III-1

Posons

$f = f^0 + Ef^1 + \text{des termes en } E^2 \text{ négligeables.}$ III-III.2

f^0 est la valeur de f en l'absence de champ électrique,

Ef^1 est la partie de f qui est linéaire avec le champ électrique,

Si nous admettons que lorsque E est différent de zéro, la fonction de distribution est déterminée par la compétition entre l'effet de perturbation dû à E et l'effet de restauration de la forme initiale due au processus de diffusion, nous avons

$$\frac{\partial f(K)}{\partial t} = \left[\frac{\partial f(K)}{\partial t} \right]_{\text{champ}} + \left[\frac{\partial f(K)}{\partial t} \right]_{\text{collisions}}$$

Soit

$$\frac{\partial f(K)}{\partial t} = \left[\frac{\partial f(K)}{\partial t} \right]_{\text{champ}} - \left[\frac{f(K) - f^0(K)}{\tau(K)} \right] \quad \text{III-III-3}$$

A l'équilibre on a $\frac{\partial f(K)}{\partial t} = 0$ et donc

$$\left[\frac{f(K)}{t} \right]_{\text{champ}} = \frac{f(K) - f^0(K)}{\tau(K)}$$

Si nous supposons que

$$S(K^0, K) = S(K^0, K^*) \quad \text{III-III-4}$$

où K^* représente l'état de la même vallée que K mais avec une vitesse opposée.

L'équation III-III-4 est une condition de vitesse aléatoire, nous verrons tout à l'heure ses limites.

Si nous admettons III-III-4, et si nous introduisons l'équation III-III-2 dans l'intégrale de III-III-1, la contribution de f^0 est nulle puisque f^0 représente la fonction de distribution en l'absence de champ électrique, nous avons alors

$$\int_{K^0} E f^{(1)}(K^0) S(K^0, K) dK^0 = 0$$

car $f^{(1)}$ est une fonction impaire de la vitesse alors que III-III-4 montre que S est une fonction paire.

L'équation III-III-1 se ramène à l'équation III-III-3 en posant

$$\frac{1}{\tau(K)} = \int_{K^0} S(K, K^0) dK^0 \quad \text{III-III-5}$$

HERRINGT et VOGT⁽¹⁴⁾ ont montré que la condition de "vitesse aléatoire" ne s'applique pas aux électrons chauds.

La probabilité de transition d'un état K à un état K' est donné par l'expression (21)

$$S(K, K') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle K | H | K' \rangle \right|^2 D [E(K')]$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \left| M(K, K') \right|^2 \cdot D$$

III-III-6

où H est l'hamiltonien d'interaction et D la densité d'états,

Nous allons considérer les cinq types de diffusion les plus importants : trois par les phonons et deux par les impuretés

III-2- Diffusion par les phonons :

Dans le cas de diffusion par les phonons, la diffusion d'un porteur d'un état K à un état K' se fait par absorption d'un phonon de vecteur d'onde K'-K ou émission d'un phonon avec un vecteur d'onde négatif. L'élément de matrice pour un tel processus a été calculé par M. ZIMAN⁽²¹⁾ et est de la forme

$$M(K, K') = N^{1/2} \frac{C(K, K')}{\gamma^{1/2}} \quad \text{pour l'absorption}$$

$$M(K, K') = (N+1)^{1/2} \frac{C(K, K')}{\gamma^{1/2}} \quad \text{pour l'émission,}$$

où N est le nombre d'occupation du mode de réseau impliqué
 γ est sa fréquence.

C(K, K') est proportionnel à l'élément de matrice, entre les états K et K', de la perturbation de l'hamiltonien électronique dû à un déplacement, des atomes du réseau, d'amplitude unité dans le mode considéré.

La probabilité de transition $S(K, K')$ est dans les cas de diffusion par les phonons

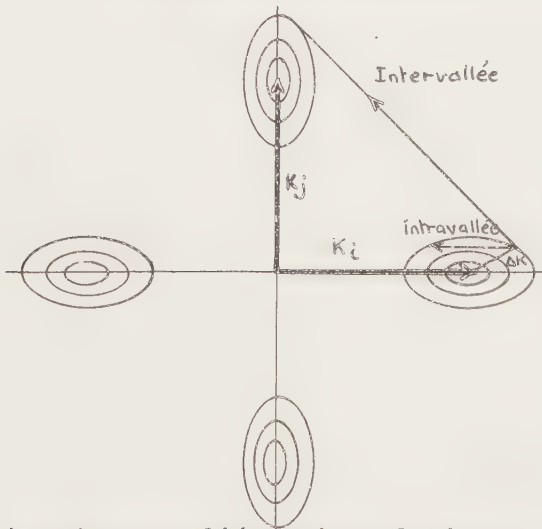
$$S(K, K') = \frac{2\pi}{h} |M(K, K')|^2 2\delta(E(K) - E(K') \pm \hbar\omega)$$

δ est le symbole de Kronecker.

Le facteur 2 provient de ce que l'on tient compte de l'émission et de l'absorption.

Il nous faut donc montrer que pour K donné, K' se trouvant sur une surface d'énergie constante : $S(K, K')$ est pratiquement constant

III-2-1- Diffusion intervallée par le réseau :



Dans la diffusion intervallée l'ordre de $K' - K$ est grand comparé à la distance de K ou K' au bord de bande le plus proche. De plus la variation totale de $\hbar$ quand K et K' sont situés sur des surfaces d'énergie constantes sera très petite devant kT si l'énergie relative au bord de bande est de l'ordre de kT . Donc le taux de variation de $M(K, K')$ sur une telle surface sera petit.

Et à moins que l'énergie relative au bord de bande soit extrêmement faible, la surface dans l'espace des K qui annule l'argument de la fonction et sera approximativement une surface d'énergie constante. Par conséquent $S(K, K')$ dans ce mode de diffusion peut être considéré comme indépendant de K et de K' quand l'un des deux (K ou K') est situé sur une surface d'énergie constante dans sa vallée. Donc l'équation III-14 est vérifiée, par conséquent la diffusion intervallée est bien décrite par un temps de relaxation donné par

l'équation III-15 qui est fonction de l'énergie seulement.

III-2-3- Diffusion intervallée par modes acoustiques -

La probabilité pour qu'un électron soit diffusé d'un état K à un état K', par l'interaction avec les ondes du réseau dépend de l'élément de matrice $C(K, K')$

$$C(K, K') = \int_V \psi(K')^* V_K \psi(K) d\tau$$

où V_K représente la perturbation produite par l'onde du réseau c'est à dire la différence entre le potentiel dans le réseau déformé $U_d(r)$ et $U_0(r)$ le potentiel périodique dans le réseau non déformé.

BARDEEN et SCHOCKLEY⁽¹⁵⁾ ont émis l'hypothèse que l'interaction des électrons avec les modes acoustiques de vibration du réseau peut se traiter comme si les déformations locales produites par les ondes du réseau avaient pour origine une déformation homogène du cristal. Dans ces conditions la diffusion des électrons est déterminée par les déplacements des bandes d'énergie associées aux potentiels de déformation dûs à cette déformation homogène. Par suite, la perturbation V_K peut être remplacée par le potentiel de déformation pour une déformation homogène, c'est à dire par $E_1 \Delta(r)$; l'approximation faite en réalisant cette substitution est de l'ordre de $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \times$ déformation, ce qui est généralement négligeable.

Donc

$$C(K, K') = \int_V \psi(K')^* E_1 \Delta(r) \psi(K) d\tau$$

et BARDEEN et SCHOCKLEY montrent finalement que

$$|C(K, K')|^2 = \frac{E_1^2 k_0 T}{2N M C_1^2 V}$$

où k_o est la constante de BOLTZMANN
 N le nombre d'atomes par unité de volume
 M la masse d'un atome
 C_1 la vitesse d'une onde longitudinale

Soit
$$|C(K, K')|^2 = \frac{E_1^2 k_o T}{2\rho C_1^2 V}$$

où $\rho = NM$ est la densité

Si on remplace ρC_1^2 par les constantes élastiques

$$\rho C_1^2 = C_{ii}$$

Nous obtenons

$$|C(K, K')|^2 = \frac{E_1^2}{C_{ii}} \frac{k_o T}{2V}$$

Dans le cas d'une vallée située dans la direction $\langle 111 \rangle$, pour une onde longitudinale, on obtient suivant la direction de $K'-K$

Pour une direction de $K'-K$ suivant $\langle III \rangle$

$$|C(K, K')|^2 = \frac{k_o T (E_d + E_u)^2}{V(C_{12} + 2 C_{44} + \frac{1}{2} C^*)}$$

Pour une direction de $K'-K$ suivant $\langle 110 \rangle$

$$|C(K, K')|^2 = \frac{k_o T (E_d + \frac{2}{3} E_u)^2}{V(C_{12} + 2 C_{44} + \frac{1}{2} C^*)}$$

Pour une direction de K^0-K suivant $\langle 100 \rangle$

$$|C(K, K')|^2 = \frac{k_B T \left(E_d + \frac{1}{3} E_u \right)^2}{V(C_{12} + 2C_{44} + C^*)}$$

Pour une direction de K^0-K suivant $\langle 1\bar{1}1 \rangle$

$$|C(K, K')|^2 = \frac{k_B T \left(E_d + \frac{1}{2} E_u \right)^2}{V(C_{12} + 2C_{44} + \frac{1}{2} C^*)}$$

Pour une direction de K^0-K suivant $\langle 1\bar{1}0 \rangle$

$$|C(K, K')|^2 = \frac{k_B T E_d^2}{V(C_{12} + 2C_{44} + \frac{1}{2} C^*)}$$

Avec $C^* = C_{11} - C_{12} - 2C_{44}$ anisotropie élastique du cristal.

Nous voyons donc que $|C(K, K')|^2$ dépend de E_d et de E_u et de la direction de K^0-K . Donc $\tau(K)$ dépend de la direction de K^0-K et de E_d et E_u . Prenons par exemple deux points K_1 et K_2 , tel que K_1 soit sur l'axe de symétrie de la surface d'énergie constante et K_2 sur un axe perpendiculaire.

La direction de K^0-K va dépendre du degré d'anisotropie des ellipsoïdes.

HERRING et VOGT⁽¹⁴⁾ ont tracé les courbes $\frac{\tau(K_1)}{\tau(K_2)}$ en fonction de $\frac{E_d}{E_u}$ pour $\frac{m_{\parallel}^*}{m_{\perp}^*} = 1$ et $\frac{m_{\parallel}^*}{m_{\perp}^*} = 16$

Nous voyons que si l'anisotropie des ellipsoïdes est grande, pour des valeurs de $\frac{E_d}{E_u} \gg 0$ $\frac{\tau(K_1)}{\tau(K_2)} \simeq 1$

Donc le temps de relaxation n'est pas une fonction de K , mais de l'énergie seulement.

Anisotrope du temps de relaxation pour la diffusion intravallée par le réseau

en fonction de θ_d / θ_u (d'après HERRING)

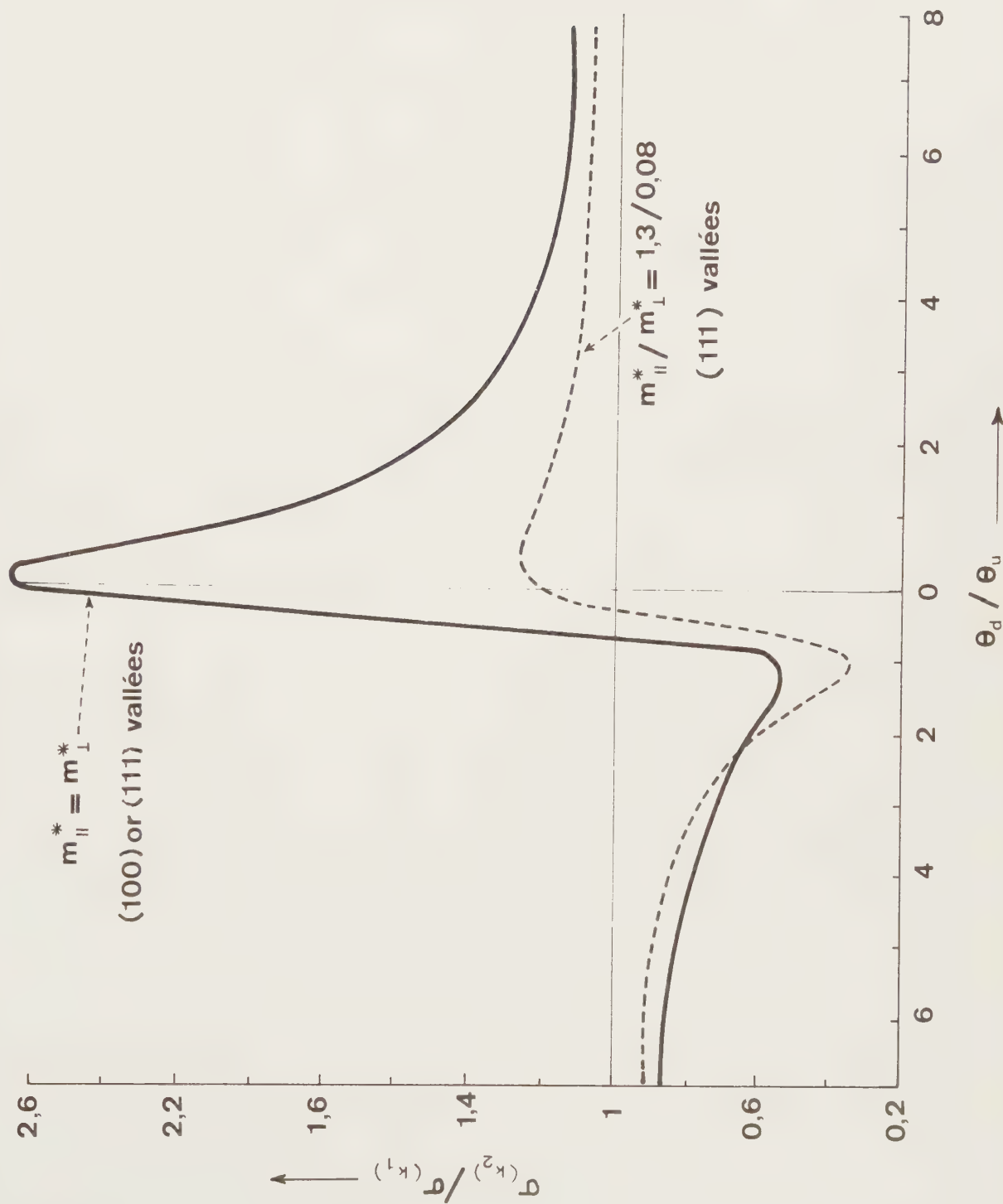


Fig : III - 5

III-2-3- Diffusion intravallée par les modes optiques -

La diffusion intravallée par les modes optiques dans les semiconducteurs covalents comme le GaSb n'est pas facile à traiter, car nous ne connaissons pas la valeur de la perturbation, et nous devons introduire un paramètre phénoménologique de valeur inconnue.

Le problème a été traité par SEITZ⁽²²⁾ nous ne le reprendrons pas dans le détail dans ce travail. Il faut déterminer la forme de la fonction apparaissant dans l'élément de matrice électron-phonon.

$$C(K, K') = \int_V \psi(K')^* V_K \psi(K) d\tau$$

où les $\psi(K)$ sont les fonctions d'ondes du réseau.

SEITZ a montré que l'on pouvait traiter ce problème comme la diffusion par les modes acoustiques à condition d'introduire un paramètre phénoménologique.

E_3 semblable au potentiel de déformation

$$\text{Nous aurons alors } C(K, K') = \frac{E_3^2 K_o T}{2\rho C_1^2 V}$$

En continuant le développement nous montrerons comme SEITZ⁽²²⁾ l'a montré que comme pour le cas de la diffusion intravallée par les modes acoustiques τ est une fonction de l'énergie seulement.

On pouvait s'attendre à ce résultat, car on peut supposer que la fréquence de vibration des modes optiques est donnée par une extrapolation du spectre des modes acoustiques et peut donc se traiter de la même manière.

III-3- Diffusion par les impuretés -

III-3-1- Diffusion par les impuretés ionisées -

La théorie quantique de cet effet a été développée par BROOKS⁽²³⁾, ZIMANN⁽²¹⁾, HERRING⁽¹³⁾, CONVELL et WEISSKOPF⁽²⁴⁾.

Le potentiel électronique est de la forme

$$V_p = \frac{Ze^2}{r^2} e^{-qr}$$

On trouve pour l'élément de matrice

$$\int \psi_{(K)}^* V_p \psi_{(K')} dr = \int e^{i(\vec{K}' - \vec{K}) \cdot \vec{r}} \frac{Ze^2}{r^2} e^{-qr} dr = \frac{4\pi Z e^2}{|K-K'|^2 + q^2}$$

BROOKS⁽²³⁾ donne la valeur exacte de q

$$q^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon kT} n \left(2 - \frac{n}{N_D}\right)$$

où ϵ est la constante diélectrique du matériau
 n le nombre de porteurs libres
 N_D le nombre de donneurs ionisés.

Nous voyons donc que l'élément de matrice est inversement proportionnel à $|K'-K|^2$ et sera d'autant plus grand que $K'-K$ est petit, comme d'autre part la probabilité de diffusion est égale au carré de l'élément de matrice, que multiplie la densité d'états, la densité des états K' étant plus grande au voisinage de K_1 qu'au voisinage de K_2 nous aurons une probabilité de diffusion qui sera au total d'autant plus grande que $|K'-K|$ est petit,

et pour un $|K' - K|$ donné elle sera plus importante en K_1 qu'en K_2 .

Par conséquent les porteurs situés près de K_1 ont un temps de relaxation effectif beaucoup plus court que ceux situés près de K_2 . Nous ne pouvons donc pas décrire ce processus de diffusion par un temps de relaxation dépendant de l'énergie seulement.

III-3-2- Diffusion par les impuretés neutres -

A des températures suffisamment basses, on peut avoir un électron se déplaçant sur une orbite stable, c'est à dire que l'impureté n'est pas nécessairement ionisée. La diffusion des électrons lents par un tel système est difficile à traiter, et il n'y a pas de solution simple. Si nous traitons l'impureté comme si c'était un atome d'hydrogène avec, une masse effective appropriée et une constante diélectrique appropriée, nous pouvons utiliser la méthode de MASSEY et MOISERVITCH⁽²⁵⁾ pour le calcul de la section droite de collision des atomes d'hydrogène pour les électrons. Comme l'ont montré ERGINSOY⁽²⁶⁾ BROOKS⁽²³⁾ à des énergies incidentes supérieures de 25% à l'énergie d'ionisation, une expression analytique de la forme $20 a_0/K$ est une bonne approximation de la section droite totale, pour un électron incident de vecteur d'onde K .

a_0 est le rayon de BOHR équivalent à l'orbite de l'atome de l'hydrogène.

Cette diffusion élastique est isotrope en direction au moins si l'énergie du porteur est suffisamment basse, ceci se montre aisément, en faisant le changement d'axes que nous avons fait dans le paragraphe I du présent chapitre.

$$\phi_{\alpha} = \frac{\hbar \Delta K_{\alpha}}{m_{\alpha}^*} = v_{\alpha} m_{\alpha}^{1/2}$$

Donc pour les faibles énergies ce processus de diffusion peut être décrit par un temps de relaxation qui est fonction de l'énergie seulement. Lorsque l'énergie du porteur devient plus élevée la section droite diminue, tandis que des effets d'ionisation compliqués interviennent.

En résumé de ce paragraphe, nous retiendrons que pour les trois processus de diffusion par les phonons, le temps de relaxation décrivant le processus, peut être considéré comme étant fonction de l'énergie seulement avec une assez bonne précision, pour la diffusion par les impuretés ionisées cette approximation n'est pas valable, mais elle est valable pour la diffusion par les impuretés neutres à condition que l'énergie des porteurs soit suffisamment faible.

Nous allons donc pour pouvoir utiliser la relation $\tau = \tau(E)$ travailler dans un domaine de température suffisamment élevé pour que la seule contribution à la conduction, soit due à la diffusion par le réseau, nous éliminerons ainsi la conduction par les impuretés qui ne permet pas l'approximation $\tau = \tau(\epsilon)$.

IV- CONDUCTIVITE -

Nous allons donc faire l'hypothèse que le temps de relaxation est une fonction de l'énergie seulement, et de plus nous supposons que les porteurs de charge ont une statistique maxwellienne. Nous pouvons alors résoudre simplement l'équation de BOLTZMANN, lorsqu'un champ électrique constant $\vec{E}$, perturbe le mouvement des électrons la probabilité d'occupation d'un état, d'énergie E , lorsque $\vec{E}$ est nul est

$$f^0 = \exp - \frac{(E - E_F)}{kT}$$

Nous avons vu que pour des ellipsoïdes d'énergie constantes centrées en $K = K^{(i)}$

$$E(K) = E_b + \frac{\Delta P_1^2}{2m_1^*} + \frac{\Delta P_2^2}{2m_2^*} + \frac{\Delta P_3^2}{2m_3^*} = E_b + \Delta E$$

Donc $f^0 = \exp - \frac{(E_b - E_F) + \Delta E}{kT}$ III-IV-1

E_F est l'énergie du niveau de Fermi

E_b est l'énergie du bord de la bande

$\Delta P_1, \Delta P_2, \Delta P_3$ les projections de ΔP sur les axes principaux des ellipsoïdes.

m_1^*, m_2^*, m_3^* sont les masses effectives suivant les axes principaux des ellipsoïdes.

Nous avons vu au paragraphe III, équation (III-III-3) que l'équation de BOLTZMANN, à l'équilibre, sous l'action d'un champ électrique E , pouvait se mettre sous la forme

$$0 = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_E - \frac{f - f^0}{\tau} \quad \text{III-IV-2}$$

Par ailleurs

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_E = \frac{\partial f}{\partial P} \left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_E = e E \nabla_P f \quad \text{III-IV-3}$$

Donc

$$e E \nabla_P f - \frac{f - f^0}{\tau} = 0 \quad \text{III-IV-4}$$

Posons

$$f(E) = f^0 + E \frac{df}{dE} + \text{des termes en } E^2 \text{ petits}$$

ou encore

$$f = f^0 + f^1 E + \dots$$

L'équation III-IV-3 devient :

$$e E \nabla_p f^0 - \frac{E f^1}{\tau} = 0 \quad \text{en négligeant les } \nabla_p f^1 \text{ qui sont petits devant } \nabla_p f^0$$

$$\text{D'où } f^1 = e \tau \nabla_p f^0 \quad (\text{III-IV-5})$$

Nous pouvons donc calculer la contribution de la 1^{ère} vallée à la densité de courant,

$$\text{car } \nabla_p f^0 = \frac{\partial f^0}{\partial \Delta E} \nabla_p \Delta E$$

Or $\Delta_p(\Delta E)$ n'est autre que la vitesse de groupe de l'électron, ΔE représentant l'énergie de l'électron par rapport au bas de la bande ($E - E_b$)

$$\Delta_p(\Delta E) = v$$

D'autre part de l'équation (III-IV-1) nous tirons

$$\frac{\partial f^0}{\partial \Delta E} = - \frac{1}{k T} f^0$$

$$\text{d'où } \Delta_p f^0 = - \frac{v}{k T} f^0$$

La contribution de la ième vallée à j est donc

$$j^{(i)} = \sum_{\Delta P(i),s} e \vec{v} (\Delta P(i)) f(\Delta P(i))$$

$$= \sum_{\Delta P(i),s} e^2 \vec{v} \tau(\Delta E) E \nabla_p f^0 + \sum_{\Delta P(i),s} e v f^0 (\Delta P(i))$$

Le deuxième terme représentant la contribution à la densité de courant de la ième vallée en l'absence de champ est identiquement nul.

Nous avons donc :

$$j^{(i)} = \sum_{\Delta P(i),s} e^2 v \tau(\Delta E) E \nabla_p f^0 \quad (\text{III-IV-6})$$

Remplaçons $\nabla_p f^0$ par la valeur trouvée

$$j^{(i)} = - \sum_{\Delta P(i),s} \frac{e^2}{kT} f^0 (\Delta P(i)) \tau(\Delta E) E v_0 v \quad (\text{III-IV-7})$$

Les composantes de $j^{(i)}$ suivant les axes principaux de la vallée sont

$$j_{\alpha}^{(i)} = - \frac{e^2}{kT} \sum_{\Delta P(i),s} f^0 \tau(\Delta E) \sum_{\beta} v_{\alpha} \cdot v_{\beta} E_{\beta} \quad (\text{III-IV-8})$$

La valeur moyenne de ΔE qui par définition est égale à :

$$\langle \Delta E \rangle = \frac{\sum_{\Delta P(i),s} \Delta E f^0}{\sum_{\Delta P(i),s} f^0}$$

est aussi égale à $\frac{3}{2} kT$ d'où

$$\frac{1}{kT} = \frac{3}{2} \frac{\sum \Delta P(i)_{,s} f^0}{\sum \Delta P(i)_{,s} \Delta E f^0}$$

On peut donc à partir de (III-IV-8) écrire :

$$J_{\alpha}^{(i)} = \frac{3}{2} e^2 \frac{\sum \Delta P(i)_{,s} f^0}{\sum \Delta P(i)_{,s} \Delta E f^0} \sum \Delta P(i)_{,s} f^0 \tau(\Delta E) \sum_{\beta} v_{\alpha} v_{\beta} E_{\beta}$$

$$J_{\alpha}^{(i)} = \frac{3}{2} e^2 n^{(i)} \frac{\sum \Delta P(i)_{,s} f^0 \tau(\Delta E) \sum_{\beta} v_{\beta} v_{\beta} E_{\beta}}{\sum \Delta P(i)_{,s} \Delta E f^0}$$

Exprimons $J_{\alpha}^{(i)}$ en fonction de la conductivité ou de la mobilité

$$j_{\alpha}^{(i)} = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^{(i)} E_{\beta} \quad (\text{III-IV-10})$$

$$j_{\alpha}^{(i)} = \sum_{\beta} n^{(i)} e \mu_{\alpha\beta}^{(i)} E_{\beta} \quad (\text{III-IV-11})$$

avec $n^{(i)}$, nombre de porteurs par unité de volume dans la vallée i .

$$n^{(i)} = \frac{\sum \Delta P(i)_{,s} f^0}{\Delta E f^0}$$

Le tenseur de conductivité totale dû aux porteurs de toutes les vallées est naturellement

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^{(i)}$$

Nous pouvons donc étudier, la variation relative de $\sigma_{\alpha\beta}$ sous l'effet d'une déformation, à partir de la formule III-IV-8.

V - ETUDE DE LA PIEZORESISTANCE DANS UNE BANDE MULTIVALLÉE -

A partir des formules (III-IV-8) et (III-IV-10) nous pouvons écrire

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(i)} = \frac{e^2}{kT} \sum \Delta P(i)_{\alpha\beta} f^0 \tau(\Delta E) v_{\alpha} v_{\beta} \quad (\text{III-V-1})$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_i \sigma_{\alpha\beta}^{(i)} = \frac{e^2}{kT} \sum_i \sum \Delta P(i)_{\alpha\beta} f^0 \tau(\Delta E) v_{\alpha} v_{\beta} \quad (\text{III-V-2})$$

Cette équation nous permet de voir immédiatement que la conductivité dépend essentiellement :

- a) de la population des vallées, c'est à dire de f^0
- b) de la vitesse de groupe des électrons
- c) de leur temps de relaxation

Quand le cristal est soumis à une déformation chacun de ces différents facteurs peut varier ; la variation résultante de la conductivité due aux contributions de ces différents facteurs est la piezorésistance de la bande multivallée.

Nous parlerons dans la théorie de coefficient d'élastorésistance, au lieu de coefficient de piezorésistance, car cela simplifie les calculs. Il faut savoir que l'on passe facilement des uns aux autres par l'intermédiaire des constantes élastiques.

On a en effet

$$\frac{d\sigma}{\sigma} = - \frac{d\rho}{\rho} = - \Pi : K$$

dù le tenseur K est la contrainte

et $K = C : \epsilon$

ϵ est la déformation

C est un tenseur de rang quatre dont les composantes $C_{\omega\lambda}$ sont liées aux coefficients d'élasticité $\overline{C_{\omega\lambda}}$ par :

$$C_{\omega\lambda} = \overline{2C_{\omega\lambda}} \quad \text{pour } \lambda = 4, 5, 6.$$

et $C_{\omega\lambda} = \overline{C_{\omega\lambda}}$ pour les autres valeurs de λ

donc $\frac{d\sigma}{\sigma} = -\Pi : C : \epsilon$

le tenseur de rang quatre : $m = \Pi : C$ est appelé tenseur d'élastorésistance

$$\frac{d\sigma}{\sigma} = -m : \epsilon$$

Hypothèse :

a) Nous admettons que la diffusion des porteurs est décrite par un temps de relaxation qui est fonction de l'énergie seulement.

b) Nous admettons qu'une vallée se déplace en bloc dans l'échelle des énergies sous l'effet d'une contrainte, en première approximation, tous les autres paramètres étant inchangés.

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\alpha\beta}}{\epsilon_{ij}} = \frac{e^2}{kT} \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \left[- \frac{\tau(i) f^0}{kT} - \frac{\partial(E^{(i)} - E^F)}{\epsilon_{ij}} (v_\alpha v_\beta)^i \right. \\ \left. + f^0 \frac{\partial \tau(i)}{\partial E^{(i)}} \frac{\partial E^i}{\epsilon_{ij}} (v_\alpha v_\beta)^i + f^0 \sum_j \frac{\partial \tau(i)}{\partial E^{(j)}} \frac{\partial E^{(j)}}{\epsilon_{ij}} + \tau(i) f^0 \frac{\partial (v_\alpha v_\beta)^i}{E_{ij}} \right] \end{aligned}$$

Si nous admettons l'hypothèse (b), cela signifie que le terme de diffusion intravallée ne va pas changer autrement dit que $\frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^{(i)}}$ est nul.

De même la variation de v_α v_β de la vallée i sera nul.

Nous avons donc au total

$$m_{\alpha\beta ij} = -\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\epsilon_{ij}} = \frac{e^2}{kT} \frac{1}{\sigma} \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \frac{\tau^{(i)} f^0}{kT} \frac{\partial (E^i - E^F)}{\epsilon_{ij}} - f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E_j} \frac{\partial E_j}{\epsilon_{ij}} v_\alpha v_\beta^{(i)}$$

III-V-3

Nous allons étudier le produit $\vec{v}_\alpha \vec{v}_\beta$

Soit $\vec{u}$ un vecteur unitaire dirigé suivant $\vec{v}$

$$\vec{v}_\alpha = v \vec{u}_\alpha \quad \vec{v}_\beta = v \vec{u}_\beta$$

$$(\vec{v}_\alpha \vec{v}_\beta)^i = v^{2(i)} (u_\alpha u_\beta) = v^{(i)^2} (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2)$$

$$= u^2 (v_1^2 + v_2^2 + v_3^2)^{(i)} = u^2 \left(\frac{m_1^* v_1^2}{m_1^*} + \frac{m_2^* v_2^2}{m_2^*} + \frac{m_3^* v_3^2}{m_3^*} \right)$$

$$u^2 = 1$$

Nous avons montré d'autre part, au début du chapitre que

$$m_1^* v_1^2 = m_2^* v_2^2 = m_3^* v_3^2 = \frac{2}{3} \Delta E$$

$$\text{Donc } (\vec{v}_\alpha \vec{v}_\beta)^i = \frac{2}{3} \Delta E^{(i)} \left(\frac{1}{m_1^*} + \frac{1}{m_2^*} + \frac{1}{m_3^*} \right) \quad \text{III-V-4}$$

Pour des surfaces d'énergie ellipsoïdales situées suivant des axes d'ordre 3 ou 4, $m_1^* = m_2^*$

la relation III-V-4 devient

$$(v_{\alpha}^0, v_{\beta}^0)^{(i)} = \frac{2}{3} \Delta E^{(i)} \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_2^*} + \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_2^*} \right) \right]$$

III-V-5

On vérifiera facilement sur les vallées situées sur les axes (100) ou (111) que les relations III-V-4 et III-V-5 sont équivalentes.

Nous avons vu dans l'étude du potentiel de déformation que

$$\frac{\partial E^i}{\epsilon_{ij}} = E_d \partial_{ij} + E_u \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)}} \quad \text{III-V-6}$$

Nous allons montrer que le comportement du niveau de Fermi est simple

Posons
$$\frac{\partial E_F}{\epsilon_{ij}} = \frac{1}{N_V} \sum_j \frac{\partial E^j}{\epsilon_{ij}}$$

Nous avons vu que pour les vallées situées suivant les axes d'ordre 4 nous avons :

$$\begin{aligned} E_1 &= E_d + E_u \\ E_2 &= E_d \\ E_3 &= E_d \end{aligned} \quad E_4 = E_5 = E_6 = 0$$

$$\begin{aligned} \partial E_i &= E_1 \epsilon_{11} + E_2 \epsilon_{22} + E_3 \epsilon_{33} + E_4 \epsilon_{23} + E_5 \epsilon_{13} + E_6 \epsilon_{16} \\ &= (E_d + E_u) \epsilon_{11} + E_d \epsilon_{22} + E_d \epsilon_{33} \\ &= E_d (\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}) + E_u \epsilon_{11} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial E_i}{\epsilon_{ij}} = \Xi_d \frac{\epsilon_{ij} \partial_{ij}}{\epsilon_{ij}} + \Xi_u \frac{\epsilon_{ij}}{\epsilon_{ij}} \frac{\partial_{ij}}{3}$$

$$= \Xi_d \partial_{ij} + \Xi_u$$

$$\frac{dE_i}{\epsilon_{ij}} = 3 \Xi_d + \Xi_u$$

Soit

$$\frac{1}{N_Y} \sum_i \frac{\partial E_i}{\epsilon_{ij}} = \left(\Xi_d + \frac{\Xi_u}{3} \right) \partial_{ij}$$

Pour les vallées situées suivant les axes d'ordre 3 :

$$\Xi_1 = \Xi_2 = \Xi_3 = \Xi_d + \frac{\Xi_u}{3}$$

$$\Xi_4 = \Xi_5 = \Xi_6 = \frac{\Xi_u}{3}$$

On a de même

$$\frac{dE_i}{\epsilon_{ij}} = 3\Xi_d + \Xi_u \Rightarrow \frac{1}{N_Y} \sum_i \frac{\partial E_i}{\epsilon_{ij}} = \left(\Xi_d + \frac{\Xi_u}{3} \right) \partial_{ij}$$

et donc

$$\frac{\partial E_F}{\epsilon_{ij}} = \left(\Xi_d + \frac{\Xi_u}{3} \right) \mu_{ij} \quad \text{(III-V-7)}$$

Si nous portons les équations (III-V-5) et (III-V-7) dans l'équation III-V-3 nous obtenons :

$$m_{\alpha\beta ij} = -\frac{1}{\sigma} \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial \epsilon_{ij}} = \frac{e^2}{kT} \frac{1}{\sigma} \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \left\{ \frac{\tau^{(i)} f^0}{kT} \left[(\epsilon_d \partial_{ij} + \epsilon_u \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K(i)2}) - \epsilon_d \partial_{ij} - \frac{\epsilon_u}{3} \right] \right. \\ \left. - f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial \epsilon_j} (\epsilon_d \partial_{ij} + \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K(j)2} \epsilon_u) \right\} \frac{2}{3} \Delta E^{(i)} \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_2^*} + \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K(i)2} \right. \\ \left. \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_2^*} \right) \right]$$

$\tau^{(i)}$ est une fonction de ΔE et de $E^{(i)} - E^{(j)}$, ce qui entraîne

$$\sum_i \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial \epsilon_j} = 0$$

Si nous étudions le terme

$$-\frac{e^2}{kT} \frac{1}{\sigma} \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} f^0 \left[\sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial \epsilon_j} (\epsilon_d \partial_{ij} + \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K(j)2} \epsilon_u) \right] \frac{2}{3} \Delta E^{(i)} \\ \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_2} + \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K(i)2} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_2^*} \right) \right]$$

il se réduit à

$$-\frac{e^2}{kT} \frac{1}{\sigma} \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} f^0 \left[\sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial \epsilon_j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K(j)2} \epsilon_u \right] \frac{2}{3} \Delta E^{(i)} \\ \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m^2} + \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K(i)2} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_2^*} \right) \right]$$

puisque $\sum_j \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \epsilon_{ij}^{\partial}$ est nul car ϵ_{ij}^{∂} n'est pas fonction de j

L'équation (III-V-8) devient donc :

$$m_{\alpha\beta ij} = - \frac{1}{\sigma} \frac{\partial \alpha_{\beta}}{\epsilon_{ij}} = \frac{e^2}{kT} \frac{3}{2} \frac{\epsilon_u}{\sigma} \sum_i \sum_{\Delta P^{(i)}, s} f^0 \left\{ \frac{\Delta E^{(i)} \tau^{(i)}}{kT} \left(\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} - \frac{\partial_{ij}}{3} \right) \right. \\ \left. \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} + \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \right] \right. \\ \left. - \Delta E^{(i)} \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1} + \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_1} \right) \right] \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(i)}}{K^{j2}} \right\} \quad (III-V-9)$$

Posons $m_{\alpha\beta ij} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{kT} \frac{\epsilon_u}{\sigma} (I_1 + I_2)$

avec

$$I_1 = \sum_i \sum_{\Delta P^{(i)}, s} \frac{\Delta E^{(i)} \tau^{(i)}}{kT} \left(\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} - \frac{\partial_{ij}}{3} \right) \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} + \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \right] f^0$$

et

$$I_2 = - \sum_i \sum_{\Delta P^{(i)}, s} \Delta E^{(i)} \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} + \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \right] \\ f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{j2}}$$

Posons $I_1 = A + B + C + D$

avec

$$A = \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \frac{\Delta E^{(i)}_C(i)}{KT} \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left[\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right] f^0$$

$$B = \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \frac{\Delta E^{(i)}_T(i)}{KT} \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} f^0$$

$$C = \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \frac{\Delta E^{(i)}_T(i)}{KT} \left(-\frac{\partial_{ij}}{3} \right) \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left[\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right] f^0$$

$$D = \sum_i \sum_{\Delta P(i),s} \frac{\Delta E^{(i)}_T(i)}{KT} \left(-\frac{\partial_{ij}}{3} \right) \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} f^0$$

Rappelons que $n^{(i)} = \sum_{\Delta P(i),s} f^0$ $n = \sum_i n^{(i)}$

et que $\langle x \rangle = \frac{\sum_{\Delta P} x f^0}{\sum_{\Delta P} f^0}$

Dans A le terme $\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$ est indépendant

de $\Delta P^{(i)}$

A devient donc

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{1}{k T} \sum_i \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \tau^{(i)} f^0 \\
 &= \frac{1}{k T} \sum_i \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \frac{\sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \tau^{(i)} f^0 \sum_{\Delta P(i), s} f^0}{\sum_{\Delta P(i), s} f^0} \\
 &= \frac{1}{k T} \sum_i \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \langle \Delta E^{(i)} \tau^{(i)} \rangle n_i
 \end{aligned}$$

Les termes $\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$ et $\langle \Delta E^{(i)} \tau^{(i)} \rangle$ sont

les mêmes pour toutes les vallées je peux donc les sortir du signe $\sum_i$ et les écrire :

$$A = \frac{n}{k T} \langle \Delta E \tau \rangle \left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \sum_i n^{(i)}$$

Donc finalement

$$A = \frac{n}{k T} \langle \Delta E \tau \rangle \left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$$

où K représente le vecteur position du centre d'une quelconque des vallées

$$B = \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \frac{\Delta E^{(i)} \tau^{(i)}}{k T} \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{\partial_{\alpha \beta}}{m_1^*} f^0$$

Nous opérons de la même façon que précédemment

$$B = \sum_i \frac{\langle \Delta E_{\tau}^{(i)} \rangle}{kT} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} n^{(i)} \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}}$$

$$B = \frac{\langle \Delta E_{\tau} \rangle}{kT} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} \sum_i n^{(i)} \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}}$$

mais $\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} = \frac{\partial_{ij}}{3}$ pour les vallées {111} et {100}

$$B = \frac{\langle \Delta E_{\tau} \rangle}{kT} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} \frac{\partial_{ij}}{3} n$$

De la même manière nous aurons

$$C = - \frac{\langle \Delta E_{\tau} \rangle}{kT} \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{3} n$$

et

$$D = - \frac{\langle \Delta E_{\tau} \rangle}{kT} \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{3} \frac{1}{m_1} n$$

les termes B et D s'annulent.

Nous avons donc

$$I_1 = \frac{n \langle \Delta E \tau \rangle}{KT} \left[\left\langle \frac{K_i K_j}{K^2} \cdot \frac{K_\alpha K_\beta}{K^2} \right\rangle_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{9} \right]$$

Etudions I_2

$$I_2 = \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \left[\frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} + \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \right] f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

je peux écrire $I_2 = E + F$

$$\text{avec} \quad E = - \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

$$F = - \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$$

$$f^0 \sum_j \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

Nous allons calculer E , en remarquant que $\Delta E^{(i)} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} f^0$ ne dépend pas de j donc E peut s'écrire

$$E = - \sum_i \sum_{\Delta P(i), s} \sum_j \Delta E^{(i)} \frac{\partial_{\alpha\beta}}{m_1^*} f^0 \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

La série étant finie je peux faire la sommation d'abord sur j ensuite sur i

$$E = - \sum_j \sum_{\Delta P(i), s} \sum_i \Delta E^{(i)} \frac{\partial \alpha \beta}{m_1^*} f^0 \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(i)}}{K^{j2}}$$

$\Delta E^{(i)}$ est constant dans la vallée i . Je peux donc le sortir de sous le signe $\sum_i$

De même $f^0 = \exp - \frac{E_b - E_F + \Delta E^{(i)}}{kT}$ est une constante dans la vallée i pour un P donné, je peux donc le sortir de sous le signe $\sum_i$

$$E = - \sum_j \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \frac{\partial \alpha \beta}{m_1^*} f^0 \sum_i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{j2}}$$

K_j ne dépend pas de i donc

$$E = - \sum_j \sum_{\Delta P(i), s} \Delta E^{(i)} \frac{\partial \alpha \beta}{m_1^*} f^0 \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{j2}} \sum_i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j}$$

$$\text{Or nous avons } \sum_i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} = 0$$

$$\text{Donc } E = 0$$

Calculons F

$$F = - \sum_i \sum_j \sum_{\Delta P(i),s} \Delta E^{(i)} \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) f^0 \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

Ceci peut s'écrire, puisque la série est nécessairement finie

$$F = - \sum_i \sum_j \sum_{\Delta P(i),s} \Delta E^i \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) f^0 \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2}$$

$$\frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \text{ ne dépend pas de } \Delta P$$

$$\Delta E^{(i)} = \frac{\Delta P_1^2}{2m_1^*} + \frac{\Delta P_2^2}{2m_2^*} + \frac{\Delta P_3^2}{2m_3^*} \quad \text{dépend de } \Delta P$$

de même que f^0 qui est une fonction de ΔE ; $\frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j}$ est aussi fonction de $\Delta E^{(i)}$

$$F = - \sum_i \sum_j \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right) \frac{\sum_{\Delta P, is} \frac{d\tau^i}{dE^j} \Delta E^{(i)} f_o}{\sum_{\Delta P(i),s} f_o} \sum_{\Delta P(i),s} f_o$$

$$F = - \sum_i \sum_j n^{(i)} < \Delta E^{(i)} \frac{\partial \tau^{(i)}}{\partial E^j} > \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2} \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$$

est indépendant des vallées considérées.

$$< \Delta E^{(i)} \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} > \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K_j^2} \frac{K_{\alpha}^{(i)} K_{\beta}^{(i)}}{K^{(i)2}} \text{ est aussi le même}$$

quand on considère deux vallées quelconques.

Dans ces conditions

$$F = - \left\langle \Delta E^{(i)} \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \right\rangle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left\langle \frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right\rangle_{ij} \sum_i \sum_j n^{(i)}$$

$n^{(i)}$ est indépendant de j et $\sum_i n^{(i)} = n$, $\sum_j 1 = N_V$

$$F = - n N_V \left\langle \Delta E^{(i)} \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \right\rangle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left\langle \frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right\rangle_{ij}$$

Donc

$$I_2 = - N_V n \left\langle \Delta E^{(i)} \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \right\rangle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \left\langle \frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right\rangle_{ij}$$

Si nous reportons I_1 et I_2 dans l'équation III-V-9, nous obtenons

$$m_{\alpha\beta ij} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{kT} n \frac{\Xi_U}{\sigma} \left\{ \frac{\langle \Delta E \tau \rangle}{kT} \left[\left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{g} \right] \right.$$

$$\left. - N_V \left\langle \Delta E^i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \right\rangle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_{ij} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$$

Si nous remplaçons σ par $n e \mu$, avec pour μ l'expression (III-IV-14) nous obtenons :

$$m_{\alpha\beta ij} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{kT} \frac{n \Xi_U m_I}{ne e} \frac{\langle \Delta E \rangle}{\langle \Delta E \tau \rangle} \left\{ \frac{\langle \Delta E \tau \rangle}{kT} \left[\left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{9} \right] \right. \\ \left. - N_V \langle \Delta E^i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^j} \rangle \left\langle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_{ij} \right\} \left(\frac{1}{m_3^*} - \frac{1}{m_1^*} \right)$$

Avec $kT = \frac{2}{3} \langle \Delta E \rangle$ et $\frac{1}{m_I} = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{m_1^*} + \frac{1}{m_3^*} \right)$

$$m_{\alpha\beta ij} = 3 \Xi_U \left\{ \frac{1}{kT} \left[\left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{9} \right] \right.$$

$$\left. - N_V \frac{\langle \Delta E^i \frac{\partial \tau^i}{\partial E^i} \rangle}{E} \left\langle \frac{K_i^{(j)} K_j^{(j)}}{K^{(j)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_{ij} \right\} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*}$$

Nous avons donc exprimé l'élastorésistance en fonction de deux termes principaux : le premier représente le transfert d'électrons entre les vallées dûes à la déformation, le deuxième représente la contribution dûe à la variation de la diffusion intervallée.

C H A P I T R E - I V -

THEORIE DU COEFFICIENT ISOTROPE

I - INTRODUCTION -

Dans le chapitre II nous avons défini la piezorésistance par la relation (1) $\frac{\partial \rho}{\rho} = \Pi : K$ (IV-1)

où K est le tenseur de contrainte, lié à la déformation ϵ par les constantes élastiques C .

$$K = C : \epsilon \quad \text{IV-2}$$

Nous avons défini l'élastorésistance m par la relation

$$m = \Pi : C \quad \text{IV-3}$$

Comme $\frac{d\sigma}{\sigma} = - \frac{d\rho}{\rho}$ nous avons vu que la contrainte était reliée à la variation de pression par

$$K = -1 \cdot dP \quad \text{IV-4}$$

où 1 est le tenseur unité.

De l'expression IV-2 appliquée au système cubique on tire

$$-3 dP = (C_{11} + 2C_{12}) (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) \quad \text{IV-5}$$

Pour C et ϵ , nous employons les notations condensées définies précédemment.

$$\text{Mais } (\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3) = \frac{dV}{V}$$

où $\frac{dV}{V}$ représente la variation relative de volume due à la pression hydrostatique.

On obtient à partir des équations IV-4 et IV-5

$$K = -1 \cdot \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \frac{dV}{V} \quad \text{IV-6}$$

Portons IV-6 dans IV-1

$$\frac{\partial \rho}{\rho} = (\pi_{11} + 2\pi_{12}) \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \frac{dV}{V}$$

Soit

$$(\pi_{11} + 2\pi_{12}) \left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \right) = \frac{d\rho/\rho}{dV/V} \quad \text{IV-7}$$

ce qui peut s'écrire compte tenu de l'équation IV-3

$$\frac{m_{11} + 2m_{12}}{3} = - \frac{d L_n \sigma}{d L_n V} \quad \text{IV-8}$$

Cette équation est analogue à $\pi_{11} + 2\pi_{12} = - \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dP}$

Il nous faut donc calculer $\frac{d\sigma}{\sigma}$

Dans le cas d'une structure de bande présentant deux bandes de conduction la conductivité totale est

$$\sigma = e(n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2)$$

$$d\sigma = e(\mu_1 dn_1 + \mu_2 dn_2) + e(n_1 d\mu_1 + n_2 d\mu_2) \quad \text{IV-9}$$

Nous allons traiter séparément ces deux termes

Nous allons étudier le cas d'une distribution dégénérée et nous étendrons les résultats obtenus au cas non dégénéré.

II - PIEZORESISTANCE DUE A LA VARIATION DES POPULATIONS SOUS L'EFFET DE LA PRESSION HYDROSTATIQUE -

Soit n_1 et n_2 le nombre d'électrons dans la bande 1 et dans la bande 2.

$$n_1 = \frac{(4 \pi)}{h^3} (2kT)^{3/2} m_1^{*3/2} F_{1/2}(n_1)$$

$$n_2 = \frac{(4 \pi)}{h^3} (2kT)^{3/2} m_2^{*3/2} F_{1/2}(n_2) \quad \text{IV-10}$$

Avec

$$\eta_1 = \frac{E_F - E_c}{kT}$$

$$\eta_2 = \frac{E_F - E_c}{kT}$$

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{\xi^{1/2} d\xi}{e^{\eta - \xi} + 1} \quad \text{intégrale de Fermi}$$

II-1- Effet dû à la variation de η_1 et de η_2

Nous allons supposer dans ce paragraphe que les masses effectives ne varient pas avec la pression.

Posons $\frac{\mu_2}{\mu_1} = b$

Supposons que le nombre total de porteurs ne varie pas avec p

Si l'on tient compte uniquement de la variation de la différence d'énergie entre les deux bandes ΔE on obtient :

$$\left. \frac{dn_1}{dp} \right|_{m^*} = - \left. \frac{dn_2}{dp} \right|_{m^*}$$

$$\left. \frac{d\sigma}{dp} \right|_{m^*, \mu} = \mu_1 \left. \frac{\partial n_1}{\partial p} \right|_{m^*} + \mu_2 \left. \frac{\partial n_2}{\partial p} \right|_{m^*}$$

$$\frac{1}{\sigma} \left. \frac{\partial \sigma}{\partial p} \right|_{m^*, \mu} = \frac{dn_1/dp + \frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{dn_2}{dp}}{n_1 + \frac{\mu_2}{\mu_1} n_2} = \frac{dn_1/dp + b \frac{dn_2}{dp}}{n_1 (1 + \alpha b)} \quad IV-11$$

avec

$$\alpha = \frac{n_2}{n_1}$$

Explicitons $\frac{dn_1}{dp}$ à partir de (IV 10).

Posons

$$C_1 = \frac{(4\pi) (2 kT)^{3/2} m_1^{*3/2}}{h^3}$$

$$C_3 = \frac{(2kT \cdot m_2^*)^{3/2} 4\pi}{h^3}$$

$$\left. \frac{dn_1}{dp} \right|_{m_1^*} = C_1 \frac{dF_{1/2}(n_1)}{dn_1} \frac{dn_1}{dp}$$

IV-12

Calculons

$$\frac{dF_{1/2}(n_1)}{dn_1}$$

$$F_{1/2}(n) = \int_0^\infty \frac{\xi^{1/2} d\xi}{e^{\xi-n} + 1}$$

De même

$$F_{-1/2}(n) = \int_0^\infty \frac{\xi^{-1/2} d\xi}{e^{\xi-n} + 1} = \int_0^\infty \frac{2d(\xi^{1/2})}{e^{\xi-n} + 1} = 2 \left[\frac{\xi^{1/2}}{e^{\xi-n} + 1} \right]_0^\infty + 2 \int_0^\infty \frac{\xi^{1/2} e^{\xi-n}}{(e^{\xi-n} + 1)^2} d\xi$$

Le terme entre crochets est nul

$$F_{-1/2}(\eta) = 2 \int_0^{\infty} \frac{\xi^{1/2} e^{\xi - \eta}}{(e^{\xi - \eta} + 1)^2} d\xi$$

Or

$$\frac{d F_{-1/2}(\eta)}{d\eta} = - \int_0^{\infty} \frac{\xi^{1/2} e^{\xi - \eta}}{(e^{\xi - \eta} + 1)^2} d\xi$$

Donc $F_{-1/2}(\eta) = 2 \frac{dF_{-1/2}(\eta)}{d\eta} \Rightarrow \frac{dF_{-1/2}(\eta)}{d\eta} = \frac{F_{-1/2}(\eta)}{2}$ IV-13

Portons cette expression dans IV-12

$$\left. \frac{dn_1}{dp} \right|_{m_1^*} = C_1 \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2} \frac{dn_1}{dp}$$
 IV-14

Portons IV-14 dans IV-11 en remplaçant n_1 par sa valeur tirée de IV-10

et $\frac{dn_2}{dp}$ par $-\frac{dn_1}{dp}$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \bigg|_{m_1^*, \mu} = \frac{C_1 F_{-1/2}(\eta_1)}{2 C_1 F_{1/2}(\eta_1)} \frac{1-b}{1+\alpha b} \frac{dn_1}{dp} = \frac{1}{2} \frac{1-b}{1+\alpha b} \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{F_{1/2}(\eta_1)} \frac{dn_1}{dp}$$
 IV-15

Il faut expliciter $\frac{dn_1}{dp}$ en fonction de $\frac{d\Delta}{dp}$ avec $\Delta = \frac{\Delta E}{kT}$

$$n_1 - n_2 = \Delta \quad \text{soit} \quad \frac{dn_1}{dp} - \frac{dn_2}{dp} = \frac{d\Delta}{dp} \quad \text{IV-16}$$

Comme d'autre part

$$\frac{dn_1}{dp} = - \frac{dn_2}{dp}$$

On a la relation

$$C_1 F_{-1/2}(n_1) \frac{dn_1}{dp} = - C_2 F_{-1/2}(n_2) \frac{dn_2}{dp}$$

$$\text{Soit} \quad \frac{dn_2}{dp} = - \frac{C_1}{C_2} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_2)} \frac{dn_1}{dp}$$

Donc de IV-16 on tire

$$\frac{dn_1}{dp} \left[1 + \frac{C_1}{C_2} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_2)} \right] = \frac{d\Delta}{dp}$$

$$\frac{dn_1}{dp} = \frac{d\Delta/dp}{\frac{C_1}{C_2} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_2)} + 1}$$

IV-17

Des équations IV-10 on déduit :

$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{C_1 F_{1/2}(n_1)}{C_2 F_{1/2}(n_2)} \Rightarrow \frac{C_1}{C_2} = \frac{n_1 F_{1/2}(n_2)}{n_2 F_{1/2}(n_1)}$$

En remplaçant $\frac{C_1}{C_2}$ par cette expression dans l'équation IV-17 on obtient :

$$\frac{dn_1}{dp} = \frac{d\Delta/dp}{\frac{1}{\alpha} \frac{F_{1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_1)} - \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_2)} + 1} \quad \text{IV-18}$$

Portons IV-18 dans IV-15

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \Big|_{m^*, \mu} = \frac{1}{2} \frac{1-b}{1+\alpha b} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{1/2}(n_1)} \frac{\alpha F_{1/2}(n_1) F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2) F_{-1/2}(n_1) + F_{1/2}(n_1) F_{-1/2}(n_2)} \frac{d\Delta}{dp}$$

Divisons numérateur et dénominateur par $F_{1/2}(n_1) F_{1/2}(n_2) F_{-1/2}(n_1)$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \Big|_{m^*, \mu} = \frac{1}{2} \frac{1-b}{1+\alpha b} \frac{\alpha F_{-1/2}(n_2) / F_{1/2}(n_2)}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \cdot \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}} \frac{d\Delta}{dp}$$

$$\Delta = \frac{E_{C2} - E_{C1}}{kT} = \frac{\Delta E}{kT}$$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{d} \bigg|_{m_{\theta}^* \mu} = \frac{1}{2kT} \frac{1-b}{1+\alpha b} \frac{\alpha F_{-1/2}(\eta_2) / F_{1/2}(\eta_2)}{1 + \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} + \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}} \frac{d\Delta E}{dp} \quad \text{IV-19}$$

II-2- Effet dû à la variation de la masse effective avec la pression -

Dans le cas de la bande 1 qui est une bande isotrope centrée en $K = \{000\}$ on admet que $m_1 \propto E_{g1}^{(27)}$

On calcule $\frac{dn_1}{dp} \bigg|_{n_1}$ à partir de l'équation IV-10

$$\frac{dn_1}{dp} \bigg|_{n_1} = \frac{3}{2} \frac{(2\pi)^{3/2}}{h^3} (2kT)^{3/2} F_{1/2}(\eta_1) m_1^{*1/2} \frac{dm_1^*}{dp}$$

$$\frac{1}{n_1} \frac{dn_1}{dp} \bigg|_{n_1} = \frac{3}{2} \frac{1}{m_1^*} \frac{dm_1^*}{dp} = \frac{3}{2} \frac{1}{E_{g1}} \frac{dE_{g1}}{dp} \quad \text{IV-20}$$

Dans le cas de la bande 2, les calculs de structure de bande de Lin et Kleinmann ⁽²⁸⁾ et de Bordure ⁽⁶⁾ montrent qu'on peut supposer avec une bonne approximation que seule la masse transversale m_T^* est sensible à l'énergie

gap E_{g2} entre la bande de valence et la bande de conduction et que $m_T \propto E_{g2}$

L'équation IV-10 donne

$$n_2 = \frac{(2\pi)^{3/2}}{h^3} (2kT)^{3/2} N_V m_L^{*1/2} m_T^* F_{1/2}(\eta_2)$$

N_V : nombre de vallées

$$\left. \frac{1}{n_2} \frac{dn_2}{dp} \right|_{\eta_2} = \frac{1}{m_T^*} \frac{dm_T^*}{dp} = \frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp} \quad \text{IV-21}$$

Des expressions IV-20 et IV-21 nous tirons

$$\left. \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \right|_{\eta} = \frac{\mu_1 n_1 \left(\frac{3}{2} \frac{1}{E_{g1}} \frac{dE_{g1}}{dp} \right) + \mu_2 n_2 \frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp}}{\mu_1 n_1 + \mu_2 n_2}$$

soit

$$\left. \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \right|_{\eta} = \frac{\frac{3/2}{E_{g1}} \frac{dE_{g1}}{dp} + \alpha b \frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp}}{1 + \alpha b} \quad \text{IV-22}$$

Donc si on fait la somme de ces deux effets dûs à la variation de η et à la variation des masses effectives, nous obtenons la contribution à la piezorésistance due à la variation de la population des deux bandes. Compte tenu des équations IV-8 et IV-5 on obtient :

$$\Pi \left| \mu = \frac{1}{2kT} \frac{1-b}{1+ab} \frac{\alpha F_{-1/2}(\eta_2)/F_{-1/2}(\eta_1)}{1 + \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} - \frac{F_{1/2}(\eta_2)}{F_{-1/2}(\eta_2)}} \frac{d\Delta F}{dp} \right.$$

IV-23

$$\frac{\frac{3}{2} \frac{1}{E_{g1}} \frac{dE_{g1}}{dp} + ab \frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp}}{1 + \alpha}$$

III - PIEZORESISTANCE DUE A LA VARIATION DES MOBILITES -

D'autre part l'étude de la mobilité en fonction de la température (9), montre qu'entre 80°K et 300°K, la diffusion par les modes acoustiques est prépondérante. (Ceci est à peu près vrai entre 80°K et 150°K, mais on a entre ces deux températures une contribution de la diffusion par les impuretés qui n'est pas négligeable). Par contre à partir de 150°K où la température est suffisamment élevée pour que toutes les impuretés soient ionisées seule la diffusion par les modes acoustiques intervient.

Le temps de relaxation d'un tel processus a été calculé à partir de la théorie du potentiel de déformation par de nombreux auteurs et est de la forme

$$\tau = \frac{\pi \hbar^4 d u_1^2}{\sqrt{2} E_1^2 m^{*3/2} (kT)^{3/2}}$$

IV-24

d est la densité du solide

u_1 est la vitesse de l'onde acoustique longitudinale

E_1 est la variation de l'énergie du bord de la bande pour une dilatation unité.

La mobilité de conductivité est donnée par E. BEER ⁽²⁹⁾

$$\mu(\eta) = - \frac{2}{3} \frac{e \tau}{m} \frac{F_0(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} = - \frac{\sqrt{2}}{3 E_1^2} \frac{\pi e \hbar^4 d u_1^2}{m^{*5/2} (kT)^{3/2}} \frac{F_0(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \quad \text{IV-25}$$

Nous allons donc étudier dans le cas du GaSb, la variation de l'expression de μ que nous venons de donner lorsque la masse effective et η varie avec la pression et ceci pour les deux bandes.

III-1- Effet dû à la variation de la mobilité μ_1 de la première bande -

La première bande de conduction dans le GaSb est une bande isotrope située en $k = (000)$ ⁽³⁰⁾

Nous avons donc

$$\mu_1 = C \cdot \frac{F_0(\eta_1)}{F_{1/2}(\eta_1)} \cdot \frac{1}{m^{*5/2}} \quad \text{IV-26}$$

avec

$$C = - \frac{\sqrt{2}}{3 E_1^2} \frac{\pi e \hbar^4 d u_1^2}{(kT)^{3/2}}$$

III-1-1- Variation de la mobilité avec la masse effective -

Nous avons donc

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu_1}{dp} \bigg|_{n_1} = - \frac{5}{2} \frac{dm_1^*}{m_1^* dp} = - \frac{5}{2} \frac{dE_{g1}}{dp} \frac{1}{E_{g1}} \quad \text{IV-27}$$

III-1-2- Variation de la mobilité avec n_1

Nous avons défini

$$F_j(n) = \int_0^\infty \frac{\xi^j d\xi}{1 + e^{\xi - \eta}} \quad \text{IV-28}$$

D'autre part nous savons que :

$$\mathcal{F}_j(n) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{\xi^j d\xi}{1 + e^{\xi - \eta}} \quad \text{IV-29}$$

De telle sorte que $F_j(n) = \Gamma(j+1) \mathcal{F}_j(n)$

(31)

D'autre part Mc. DOUGALL et STONER ont montré que

$$\mathcal{F}_j(n) = \frac{d}{d\eta} \mathcal{F}_{j-1}(n)$$

Donc nous pouvons écrire que la dérivée de $F_0(\eta)$

$$\frac{dF_0(\eta)}{d\eta} = \Gamma(1) \mathcal{F}_{-1}(\eta)$$

Soit en remplaçant

$$\mathcal{F}_{-1}(\eta) \quad \text{par} \quad \frac{1}{\Gamma(0)} F_{-1}(\eta)$$

$$\frac{dF_0(\eta)}{d\eta} = \frac{\Gamma(1)}{\Gamma(0)} F_{-1}(\eta) \quad \text{Mais} \quad \Gamma(1) = \Gamma(0) = 1$$

$$\text{Donc} \quad \frac{dF_0(\eta)}{d\eta} = F_{-1}(\eta)$$

Donc si nous décrivons μ_1 par rapport à η nous obtenons

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu_1}{dp} \Big|_{m^*} = \frac{F_1(\eta_1)F_{1/2}(\eta_1) - \frac{1}{2} F_0(\eta_1) F_{-1/2}(\eta_1)}{(F_{1/2}(\eta_1))^2} \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} \frac{d\eta_1}{dp}$$

$$\text{Soit} \quad \frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu_1}{dp} \Big|_{m^*} = \left[\frac{F_{-1}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2F_{1/2}(\eta_1)} \right] \frac{d\eta_1}{dp} \quad \text{IV-31}$$

Nous avons trouvé dans le paragraphe précédent que

$$\frac{d\eta_1}{dp} = \frac{\frac{d\Delta}{dp}}{\frac{1}{\alpha} \frac{F_{1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_2)} + 1} \quad \text{IV-32}$$

Donc

$$\frac{1}{\mu_1} \frac{d\mu_1}{dp} \Big|_{m^*} = \left[\frac{F_{-1}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2F_{1/2}(\eta_1)} \right] \frac{d\Delta/dp}{\frac{1}{\alpha} \frac{F_{1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_1)} + \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_2)} + 1}$$

IV-33

Donc la variation totale de mobilité due à la pression pour la bande 1 est :

$$\begin{aligned} \frac{d\mu_1}{dp} &= \frac{\partial \mu_1}{\partial p} \Big|_{\eta} + \frac{\partial \mu_1}{\partial p} \Big|_{m^*} \\ &= \left\{ -\frac{5}{2} \frac{dE_{g1}}{dp} \frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{kT} \frac{d\Delta E}{dp} \frac{\alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{1/2}(\eta_2)} \times \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{-1/2}(\eta_1)}}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}} \right. \\ &\quad \left. \left[\frac{F_{-1}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2F_{1/2}(\eta_1)} \right] \right\} \mu_1 \end{aligned}$$

IV-34

III-2- Effet dû à la variation de la mobilité μ_2 de la deuxième bande :

La deuxième bande de conduction centrée en $k = (111)$ est une bande multivallée, d'après l'hypothèse que nous avons faite dans le chapitre précédent : les bandes situées suivant les axes d'ordre 3 ou d'ordre 4 sont des bandes multivallées.

Dans ce cas l'expression :

$$\mu_2 = \frac{C}{m^{*5/2}} \frac{F_o(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}$$

devient

$$\mu_2 = \frac{C}{m_1^* m_2^*} \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_1^*} + \frac{2}{m_2^*} \right] \frac{F_o(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} \quad \text{IV-35}$$

Car

$$m^{*-5/2} = (m_3^* m_1^{*2})^{-1/2} \frac{1}{3} (m_3^{*-1} + 2 m_1^{*-1}) \quad \begin{matrix} m_1^* = m_2^* = m_T \\ m_3^* = m_L \end{matrix}$$

III-2-1- Variation de μ_2 avec la masse effective -

Dans le paragraphe II de ce chapitre nous avons vu que seule la masse transversale m_1^* est sensible à E_{g2} et que en première approximation

$$m_1^* \propto E_{g2}$$

Dans ces conditions si nous décrivons μ_2 par rapport à la pression à η_2 constant, nous obtenons

$$\left. \frac{1}{\mu^2} \frac{d\mu_2}{dp} \right|_{\eta_2} = - \frac{\frac{4}{m_1^*} + \frac{1}{m_3^*}}{\frac{2}{m_1^*} + \frac{1}{m_3^*}} \frac{dm_1^*}{m_1^*}$$

$$\left. \frac{1}{\mu_2} \frac{d\mu_2}{dp} \right|_{\eta_2} = - \frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp} \frac{1 + 4K}{1 + 2K}$$

IV-36

où K représente l'anisotropie des ellipsoïdes c'est à dire $\frac{m_3^*}{m_1^*}$

III-2-2- Variation de la mobilité μ_2 avec η_2

Nous traiterons cette partie d'une manière absolument identique au sous paragraphe IV-III-1-2 et nous aurons une équation analogue à l'équation IV-31.

$$\left. \frac{1}{\mu^2} \frac{d\mu^2}{dp} \right|_{m^*} = \left[\frac{F_{-1}(\eta_2)}{F_0(\eta_2)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{2F_{1/2}(\eta_2)} \right] \frac{d\eta_2}{dp}$$

IV-37

D'autre part l'équation IV-16 du paragraphe IV-II-1 du présent chapitre nous permet de calculer $\frac{d\mu_2}{dp}$

$$\frac{dn_2}{dp} = \frac{dn_1}{dp} + \frac{d\Delta}{dp}$$

$$\frac{dn_2}{dp} = \frac{d\Delta}{dp} \left[\frac{\alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}}} - 1 \right]$$

$$\frac{d\Delta}{dp} = \frac{1}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}}$$

IV-38

Portons cette expression dans IV-37

$$\frac{1}{\mu^2} \frac{d\mu_2}{dp} \Big|_{m^*} = - \left[\frac{F_{-1}(n_2)}{F_0(n_2)} - \frac{F_{-1/2}(n_2)}{2F_{1/2}(n_2)} \right] \frac{d\Delta E}{dp} \frac{1}{kT} \frac{1}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}}$$

IV-39

Donc la variation totale de mobilité due à la pression pour la bande 2 est :

$$\frac{d\mu_2}{dp} = \left. \frac{d\mu_2}{dp} \right|_{\eta} + \left. \frac{d\mu_2}{dp} \right|_{m_2^*}$$

$$\frac{d\mu_2}{dp} = \left[-\frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp} \frac{1+4K}{1+2K} - \left\{ \frac{F_{-1}(\eta_2)}{F_0(\eta_2)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{2F_{1/2}(\eta_2)} \right\} \frac{d\Delta E}{dp} \frac{1}{kT} \right. \\ \left. \frac{1}{1+\alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}} \right] \mu_2$$

IV-40

A partir des expressions IV-34 et IV-40, nous pouvons en tirer l'expression de la variation de la conductivité due à la variation de la mobilité

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \Big|_n = \frac{n_1 \frac{d\mu_1}{dp} + n_2 \frac{d\mu_2}{dp}}{n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2}$$

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dp} \Big|_n = (1+b)^{-1} \left\{ -\frac{5}{2} \frac{dE_{g1}}{dp} \frac{1}{E_{g1}} + \frac{1}{kT} \frac{d\Delta E}{dp} \alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{1/2}(\eta_2)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \right. \\ \left. \alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} + 1 \right\}$$

$$\left[\frac{F_{-1}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2F_{1/2}(\eta_1)} \right]$$

$$- \left[\frac{1}{E_{g2}} \frac{dE_{g2}}{dp} \frac{1+4K}{1+2K} + \left(\frac{F_{-1}(\eta_2)}{F_0(\eta_2)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{2F_{1/2}(\eta_2)} \right) \frac{1}{1+\alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}} \frac{1}{kT} \frac{d\Delta E}{dp} \right] \alpha b \Bigg\}$$

Si nous combinons les équations IV-23 du paragraphe II et IV-41 du paragraphe III, nous obtenons la piezorésistance totale due à l'application d'une pression hydrostatique.

$$\Pi_p = \frac{1}{\sigma} \left. \frac{d\sigma}{dp} \right|_{\mu} + \frac{1}{\sigma} \left. \frac{d\sigma}{dp} \right|_n$$

Dans l'expression de Π nous avons des termes en $\frac{dE_{g1}}{dp}$, $\frac{dE_{g2}}{dp}$ et $\frac{d\Delta E}{dp}$

Posons que

$$E_{g2} - E_{g1} = \Delta E$$

ce qui entraîne $\frac{dE_{g2}}{dp} = \frac{d\Delta E}{dp} + \frac{dE_{g1}}{dp}$

Si nous groupons les termes en $\frac{dE_{g1}}{dp}$ et $\frac{d\Delta E}{dp}$ nous obtenons :

$$\Pi = \frac{d\Delta E}{dp} \frac{1}{1+ab} \left\{ \frac{a}{E_{g2}} \left(1 - \frac{1+4K}{1+2K} \right) + \frac{a}{kT} \frac{1}{1+\alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}} \right\}$$

$$\left[\frac{1-b}{2} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)} + \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{-1/2}(n_1)} \right]$$

$$\left(\frac{F_{-1}(n_1)}{F_0(n_1)} - \frac{F_{-1/2}(n_1)}{2F_{1/2}(n_1)} \right) - b \left(\frac{F_{-1}(n_2)}{F_0(n_2)} - \frac{F_{-1/2}(n_2)}{2F_{1/2}(n_2)} \right) \left. \right\}$$

$$+ \frac{dE_{g1}}{dp} \frac{1}{1+ab} \left\{ -\frac{1}{E_{g1}} + \frac{ab}{E_{g2}} \left[1 - \frac{1+4K}{1+2K} \right] \right\} \quad \text{IV-42}$$

C H A P I T R E - V -

THEORIE DE L'EFFET HALL

ETUDE DU COEFFICIENT DE HALL ET DE LA CONDUCTIVITE DANS LE CAS D'UN

SEMICONDUCTEUR A DEUX BANDES DE CONDUCTION -

I - APPROXIMATION SPHERIQUE -

Nous considérons d'abord un semiconducteur ne possédant qu'un seul type de porteurs de charge ; les électrons d'une bande de conduction simple, c'est à dire que nous considérons un modèle simple défini par une masse effective m^* et un temps de relaxation τ isotropes.

Le temps de relaxation est fonction de l'énergie de l'électron de cette bande, cette énergie est :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

V-1

k est le module du vecteur d'onde

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad h \text{ constante de PLANCK}$$

Si nous appliquons un champ électrique $\vec{E}$ au cristal il en résulte une densité de courant :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad V-2$$

où $\sigma = n e \mu \quad V-3$

σ est la conductivité qui dans le cas particulièrement simple où nous nous sommes placés, est un scalaire ainsi que la mobilité,

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle \quad V-4$$

n est la densité des électrons dans la bande de conduction

$\langle \tau \rangle$ désigne une moyenne pondérée de τ effectuée sur la densité des électrons de la bande de conduction et définie par :⁽³²⁾

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^{\infty} \tau(E) E^{3/2} f(E) dE}{\int_0^{\infty} E^{3/2} f(E) dE} \quad V-5$$

où $f(E)$ est la fonction de distribution en énergie des électrons. Si nous supposons que la population de ces électrons n'est pas dégénérée la fonction $f(E)$ devient :

$$f(E) = A \exp - \frac{E}{k T} \quad V-6$$

k est la constante de BOLTZMANN

T la température

Si on pose $x = \frac{\epsilon}{k T}$

$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau x^{3/2} e^{-x} dx \quad V-7$$

Toute moyenne $\langle y(x) \rangle$ sera définie par conséquent par

$$\langle y(x) \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} y(x) x^{3/2} e^{-x} dx \quad V-8$$

Dans un système d'axes trirectangles Ox, Oy, Oz plaçons un parallélépipède monocristallin semiconducteur de type n, parcouru dans sa longueur (parallèle à Ox), grande par rapport aux autres dimensions, par un courant de densité j, $\vec{j}$ et $\vec{E}$ sont parallèles

Si nous appliquons à l'échantillon un champ magnétique H_z , sous son influence les électrons tendent à dévier de leur trajectoire initiale avec une force proportionnelle à μH la géométrie de l'échantillon est telle qu'il n'y a pas de courant transverse $j_y = 0$, et un champ électrique E_y , appelé champ de Hall, apparaît qui s'oppose à la force de déflexion des électrons.

Le temps de relaxation τ étant fonction de l'énergie des électrons, ces derniers ne possèdent pas tous la même mobilité, par suite, la force électrostatique résultant du champ de Hall ne compense pas exactement la force de Lorentz pour tous les électrons ; certains ont une

trajectoire incurvée et il y a en présence des courants transverses opposés dont la somme est nulle. L'interaction de ces courants avec le champ magnétique provoque une variation de la conductivité longitudinale, c'est le phénomène de magnétorésistance. Si le champ magnétique $\vec{H}$ est parallèle au vecteur densité de courant $\vec{J}$, il n'apparaît ni champ de Hall, ni magnétorésistance. Si on admet une fonction de distribution de Maxwell Boltzmann, $f(\mathcal{E})$, la solution de l'équation de transport de Boltzmann ⁽³³⁾

$$e\hbar^{-1} (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{H}) \cdot \vec{\nabla}_K f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{collisions}} \quad V-9$$

où $\vec{v}$ est la vitesse de l'électron, permet le calcul de la densité de courant

$$\vec{J} = \int_0^\infty e \vec{v} f(\mathcal{E}) N(\mathcal{E}) d\mathcal{E} \quad V-10$$

$N(\mathcal{E})$ étant la densité d'états dans la bande de conduction

On trouve pour les composantes de $\vec{J}$

$$J_x = \frac{ne^2}{m^*} \left[\left\langle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle E_x - \omega \left\langle \frac{\tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle E_y \right] \quad V-11$$

$$J_y = \frac{ne^2}{m^*} \left[\omega \left\langle \frac{\tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle E_x + \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle E_y \right] \quad V-12$$

$$J_z = 0$$

où $\omega = \frac{eH}{m^*}$ est la pulsation de résonance cyclotron

$j_y = 0$ est imposé par la géométrie de l'échantillon

Les équations V-11 et V-12 peuvent s'écrire :

$$j_x = AE_x - BE_y \quad \text{V-13}$$

$$0 = BE_x + AE_y \quad \text{V-14}$$

Le coefficient de Hall, R_H , défini par $E_y = R_H j_x B_z$ et la résistivité ρ_H en présence d'un champ magnétique s'écrivent respectivement :

$$R = - \frac{B}{(A^2 + B^2) H} \quad \text{V-15}$$

$$\rho_H = \frac{A}{A^2 + B^2} \quad \text{V-16}$$

Dans le cas particulier des champs magnétiques faibles $\omega\tau \ll 1$, et on a :

$$R = - \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \frac{1}{n e} = - r \frac{1}{n e} \quad \text{V-17}$$

V-II - DOUBLE BANDE DE CONDUCTION -

Si la conduction est due à deux types de porteurs comme c'est le cas pour le GaSb, si l'on suppose les deux bandes sphériques les expressions V-13 et V-14 restent vraies en remplaçant A et B respectivement par (34)

$$A = A_1 + A_2$$

et $B = B_1 + B_2$

Les indices 1 et 2 se rapportant à la bande 1 et 2

On obtient alors pour R

$$R_H = \frac{\sigma_1^2 R_1 + \sigma_2^2 R_2 + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_1 R_2 H^2 (R_1 + R_2)}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2 + \sigma_1^2 \sigma_2^2 H^2 (R_1 + R_2)^2} \quad V-18$$

où σ_1 et R_1 sont la conductivité et la constante de Hall du premier type de porteurs

σ_2 et R_2 sont la conductivité et la constante de Hall du deuxième type de porteurs.

Dans le cas de faibles champs et pour des bandes dégénérées

$$\sigma_H = \sigma_0$$

$$R_1 = - \frac{r_1}{n_1 e}$$

$$R_2 = - \frac{r_2}{n_2 e}$$

avec $r_1 = \frac{\langle \tau_1^2 \rangle}{\langle \tau_1 \rangle^2}$

$$r_2 = \frac{\langle \tau_2^2 \rangle}{\langle \tau_2 \rangle^2}$$

En posant

$$\beta = \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1}$$

$$\alpha = \frac{n_2}{n_1}$$

$$b = \frac{\mu_2}{\mu_1}$$

$$\lambda = \frac{r_2}{r_1}$$

$$R_H = \frac{1 + \beta^2 \frac{R_2}{R_1} + \sigma_2^2 R_2 H^2 (R_1 + R_2)}{(1 + \beta)^2 + \sigma_2^2 H^2 (R_1 + R_2)^2} \quad V-19$$

Dans le domaine de H où nous travaillons R_H ne dépend pas de H, de telle sorte que nous pouvons négliger les termes de H^2 , on a alors

$$R_H = R_1 \frac{1 + \beta^2 \frac{1}{\alpha}}{(1 + \beta)^2}$$

ou en développant

$$R_H = - \frac{r_1}{n_1 e} \frac{1 + \frac{n_2}{n_1} \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2 \frac{r_2}{r_1}}{1 + \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1}} \quad \text{V-20}$$

II-1- Double bande de conduction avec une bande anisotrope -

R_2 devient $R_2 = - \frac{r_2^2}{n_2 e} F$, où F est un facteur d'anisotropie égal à

$$\frac{3K(K+2)}{(2K+1)^2}$$

L'expression V-20 devient alors

$$R_H = \frac{r_1}{n_1 e} \frac{1 + \frac{n_2}{n_1} \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2 \frac{r_2}{r_1} F}{\left(1 + \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2} \quad \text{V-21}$$

Dans la relation V(21) donnant la constante de Hall R_H , on peut prendre $r_1 = 1$ de même le terme $\frac{r_2}{r_1} F$ est très voisin de 1 ⁽⁶⁾

On obtient donc l'expression classique

$$R_H = \frac{1}{n_1 e} \frac{1 + \frac{n_2}{n_1} \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2}{\left(1 + \frac{n_2 \mu_2}{n_1 \mu_1}\right)^2}$$

Soit

$$R_H = \frac{1}{e} \frac{n_1 \mu_1^2 + n_2 \mu_2^2}{(n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2)^2} \quad V-22$$

la conductivité dans le cas où deux types de porteurs participent à la conduction est :

$$\sigma = n_1 e \mu_1 + n_2 e \mu_2 \quad V-23$$

avec

$$\mu_1 = \frac{e}{m_1^*} \langle \tau_1 \rangle$$

$$\mu_2 = \frac{e}{m_2^*} \langle \tau_2 \rangle$$

C H A P I T R E - VI -

TECHNIQUES EXPERIMENTALES

ECHANTILLONS -

Les échantillons sont découpés dans les lingots obtenus par tirage (méthode de CZOCHRALSKI). Le GaSb étant naturellement de type p, accepteur résiduel, il est nécessaire d'introduire un dopant dans le bain pour le rendre de type n. Nos échantillons sont dopés au tellure.

Les lingots tirés dans la direction $\langle 111 \rangle$ sont orientés aux rayons X (méthode de LAUE), pour déterminer exactement leur axe de tirage lorsqu'ils sont démontés. Des tranches sont taillées dans le lingot suivant différents plans cristallographiques. Ces tranches de 2mm d'épaisseur sont découpées par une scie à fil, ce mode de découpage a l'avantage de ne pas perturber le réseau cristallin. Ces tranches sont ensuite passées à nouveau aux rayons X, pour déterminer les axes cristallographiques contenus dans leur plan et que l'on recherche. On découpe alors dans ces tranches les échantillons

avec l'orientation désirée. Ce travail de découpage se fait avec une usineuse à ultrasons équipée d'une table de travail à mouvements de translation en X et Y (précision $\pm 10\mu$) et à mouvement de rotation (précision $\pm 1'$).

Les échantillons découpés ont la forme et les dimensions données dans la figure n° VI-1.

Tous les échantillons ainsi obtenus ont rigoureusement les mêmes côtes puisqu'ils sont découpés avec la même matrice.

Une dernière orientation sur les échantillons nous permet de dire que l'axe de l'échantillon est défini à mieux que $\pm \frac{1}{2}$ degré. Les échantillons sont alors polis, puis nettoyés chimiquement.

Les contacts électriques sur l'échantillon sont effectués par microsoudure à l'étain, avec des fils de cuivre de 2/10 de mm de diamètre. Les contacts sur le GaSb de type n se réalise très facilement, contrairement au Germanium ou au GaP, qui demandent des techniques plus élaborées (microsoudure électrique=thermoccompression ou nickelage des parties à souder, par dépôt électrolytique).

Tous nos contacts sont parfaitement ohmiques, ils sont vérifiés au transigraphe.

Les sondes latérales servent à la mesure de la résistivité; les sondes opposées à la mesure de la tension de Hall.

L'existence de deux paires de sondes nous permet de contrôler l'homogénéité de l'échantillon.

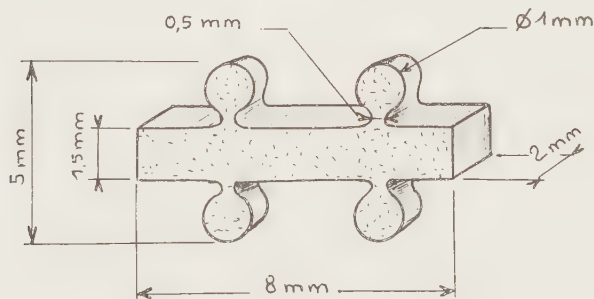


Figure VI-1

-II- DISPOSITIF POUR PRESSION HYDROSTATIQUE -

Le problème que nous avons à résoudre était le suivant :

- a) obtenir des pressions de l'ordre de $2000 \text{ à } 3000 \text{ Kg/cm}^2$ sur une gamme de température allant de 77°K à 300°K ,
- b) Appliquer ces pressions sur un échantillon de GaSb

Ces données entraînaient différentes servitudes, les plus importantes étant : choisir un fluide ne risquant pas de se solidifier largement au-dessus de 77°K , compte tenu de la pression exercée ; le fluide choisi ne devant pas contaminer nos échantillons.

Nous avons adopté pour ces différentes raisons, le procédé du compresseur thermique, et comme fluide l'azote.

Ce procédé a d'autre part l'avantage de nous rendre indépendant vis à vis de tous compresseur mécanique, donc présente une grande souplesse d'emploi.

-II-1- Compresseur thermique -

La pression est produite par réchauffement, sous volume constant d'un gaz préalablement refroidi ou condensé.

II-1-1- Principe de fonctionnement -

Le principe est schématisé sur la figure n° VI-2

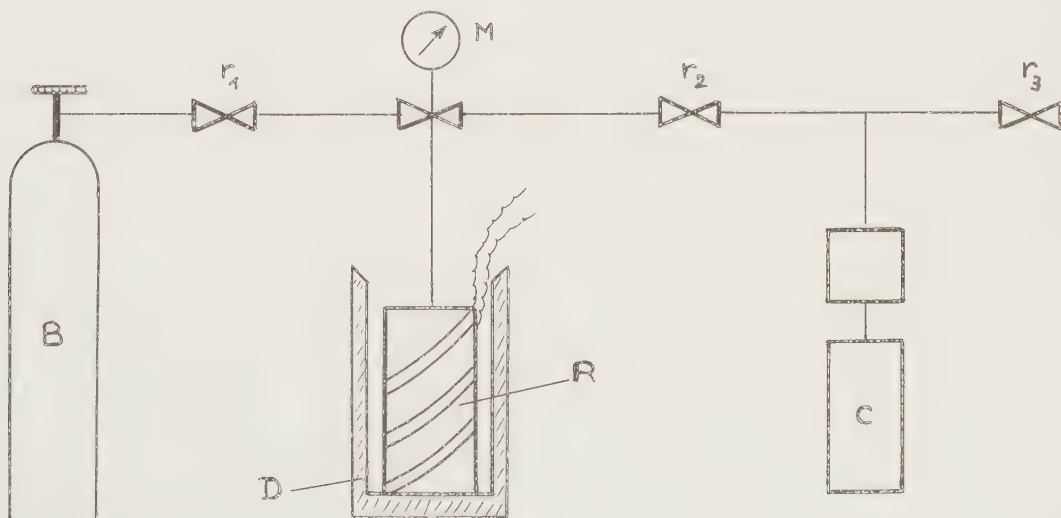


Figure - VI-2-

On effectue un balayage de l'ensemble des appareils avec le gaz à comprimer contenu dans la bouteille B sous 200 Kg/cm^2 .

On ferme les robinets r_3 et r_2 , r_1 restant ouvert, on refroidit le réservoir R dans un récipient D rempli et approvisionné en azote liquide. On considère que R a atteint sa température d'équilibre dans l'azote liquide, si lorsqu'on ferme r_1 , la pression contrôlée par le manomètre M ne descend plus. On ferme alors r_1 , on enlève B, R est rempli du gaz condensé généralement liquide.

On réchauffe R par l'intermédiaire de 3 résistances chauffantes de 2KW chacune qui sont enroulées autour de R (l'enceinte à azote liquide D est à double parois et thermiquement isolée avec de la laine de laitier) la pression s'élève dans R. Le robinet r_2 permet le passage du gaz dans la cellule de mesure E, le robinet r_3 permet de rejeter les gaz dans l'atmosphère.

-II-2-2- Description du réservoir R -

Le corps est constitué d'un cylindre d'acier spécial LHP auto Frette d'une longueur de 95cm. L'intérieur ne présente aucun trait d'outil et est glacé.

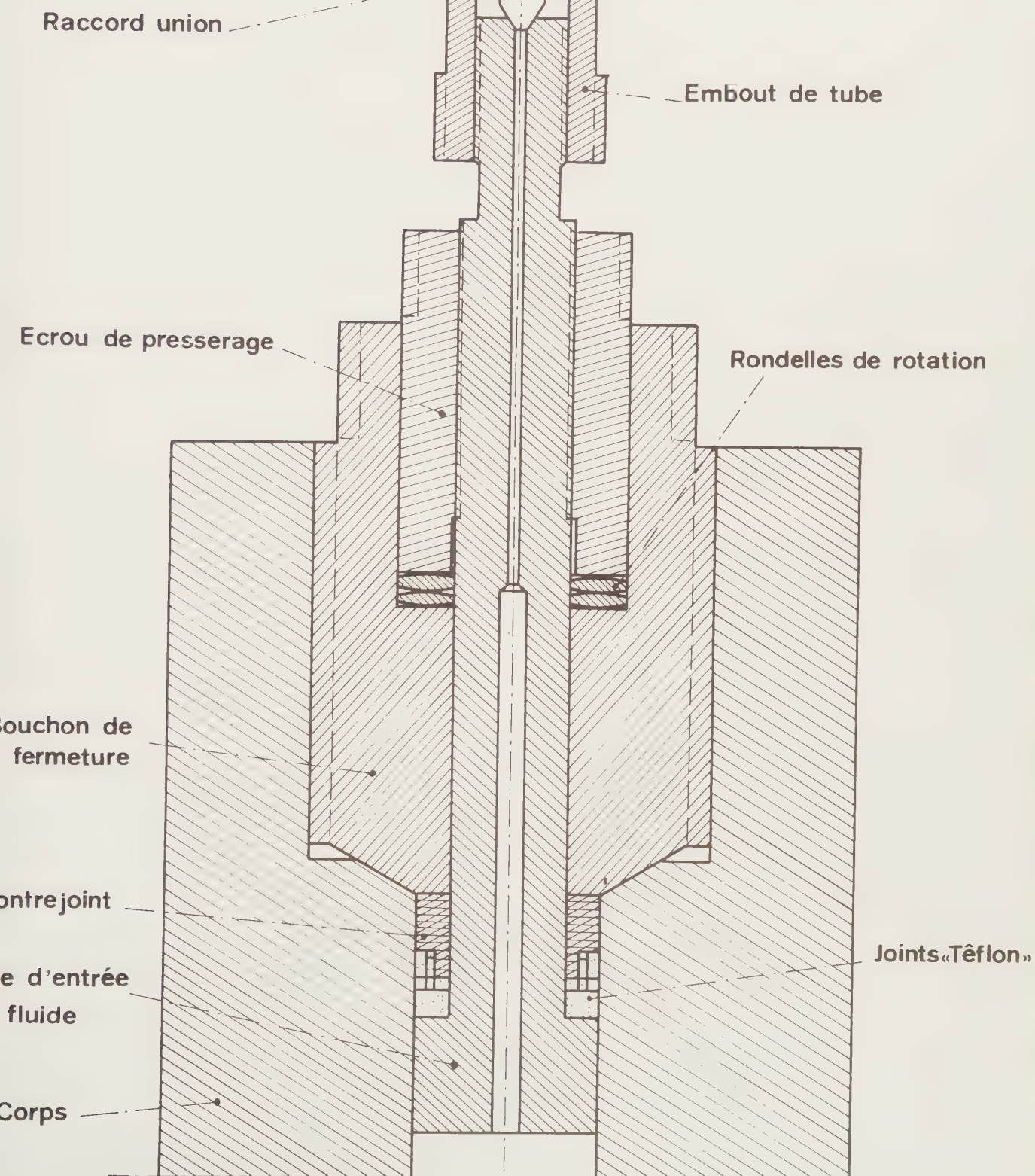
Le rapport des diamètres extérieur et intérieur est de 3,7 ce qui correspond à un coefficient de sécurité élevé pour les pressions auxquelles il est destiné (3000 Kg) le système de fermeture est identique à chaque extrémité et est reproduit sur la fig. VI-3.

Un écrou de presserage permet la mise en forme des joints puis la pression elle-même serre l'ensemble des joints (joints autoserreurs), la première montée en pression rend l'étanchéité complète.

Un tel réservoir ne présente pratiquement pas de danger d'explosion par suite du grand rapport D/d et de la malléabilité de l'acier employé ⁽³⁵⁾ (dilatation de 20 à 50% avant rupture).

compresseur

thermique



En cas de fausse manoeuvre occasionnant une montée exagérée de la pression on assisterait vers 10000 atmosphères à une augmentation du diamètre intérieur au niveau des joints occasionnant une fuite de gaz comprimé.

II-2- Cellule de mesure -

Elle est représentée sur la fig. (VI-4) le corps (1) est en bronze berillium de façon à permettre des mesures d'effet piezo Hall.

On remarquera ses possibilités de démontage rapide.

Les puits (2) sont les logements des thermocouples. Leurs extrêmités sont à 1mm de la paroi intérieure.

Lorsque le régime d'équilibre est atteint, les deux thermocouples indiquent la même température. Le porte échantillon est représenté en 3. Il se fixe facilement sur la broche femelle.

Le joint en argent qui assure l'étanchéité est en 5.

Les fils électriques partent de la broche femelle, passent à l'intérieur du tube HP, guidé par des guide-fils en alumine et vont sur le bloc des entrées de courant.

La cellule de mesure est refroidie dans un dewar à azote liquide et du fait de sa grande masse, elle présente une inertie thermique importante de telle sorte que la remontée en température s'effectuera lentement.

II-3- Corps entrées de courant -

Le corps entrées de courant est représenté sur la fig. VI5. Il est situé à 50cm au-dessus de la cellule de mesure, c'est à dire à la température ambiante. Les passages de courant (1) sont constitués par des petits cônes d'acier isolés du corps par une gaine conique en Makrolon (2) de 4/10 de mm d'épaisseur. Cette gaine d'une seule pièce isole toute la longueur du passage de courant. La pression assure l'étanchéité de ce montage. Aux deux extrêmités du passage de courant, on raccorde les fils par soudure à l'étain.

Cellule de mesure

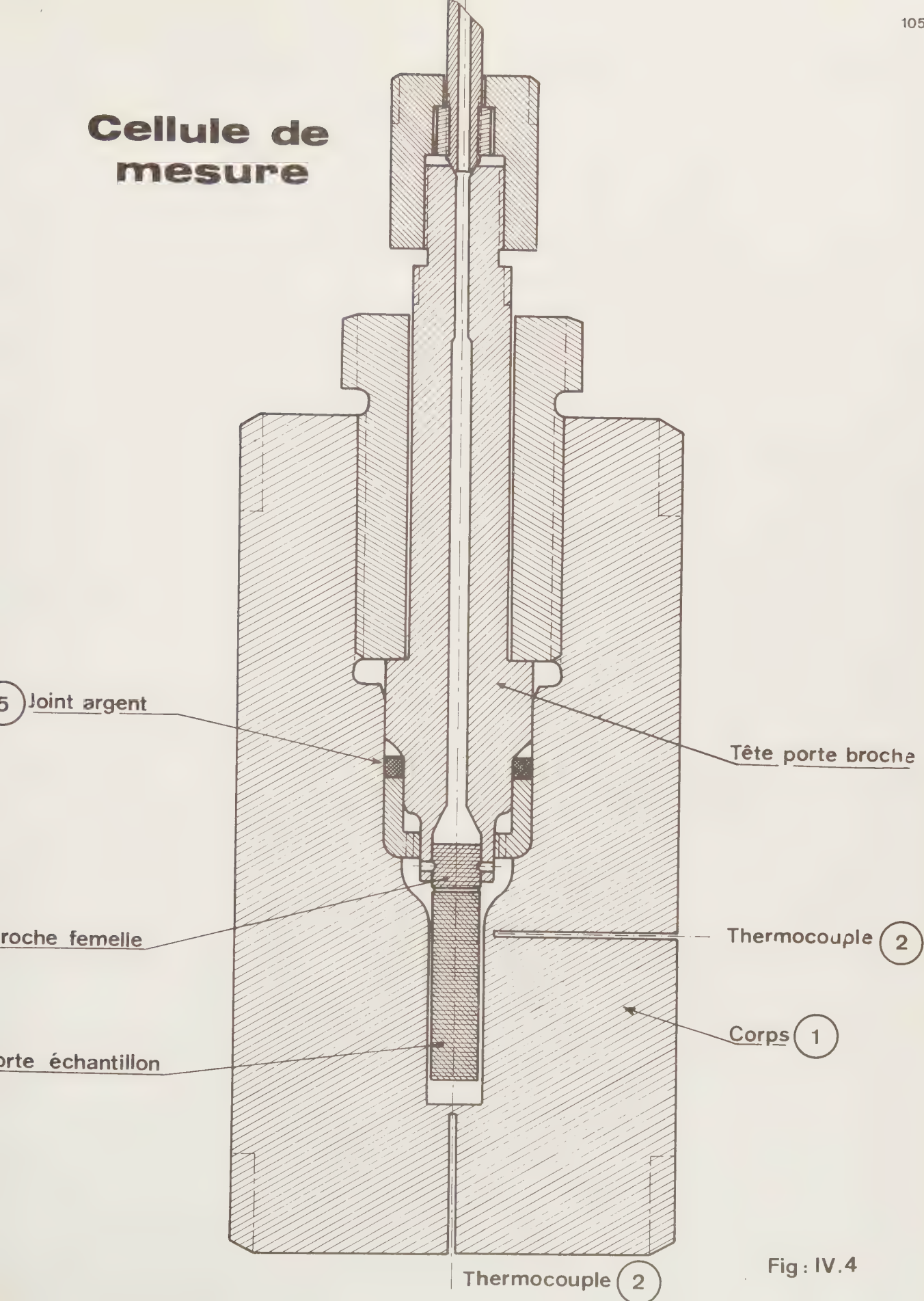


Fig : IV.4

Corps

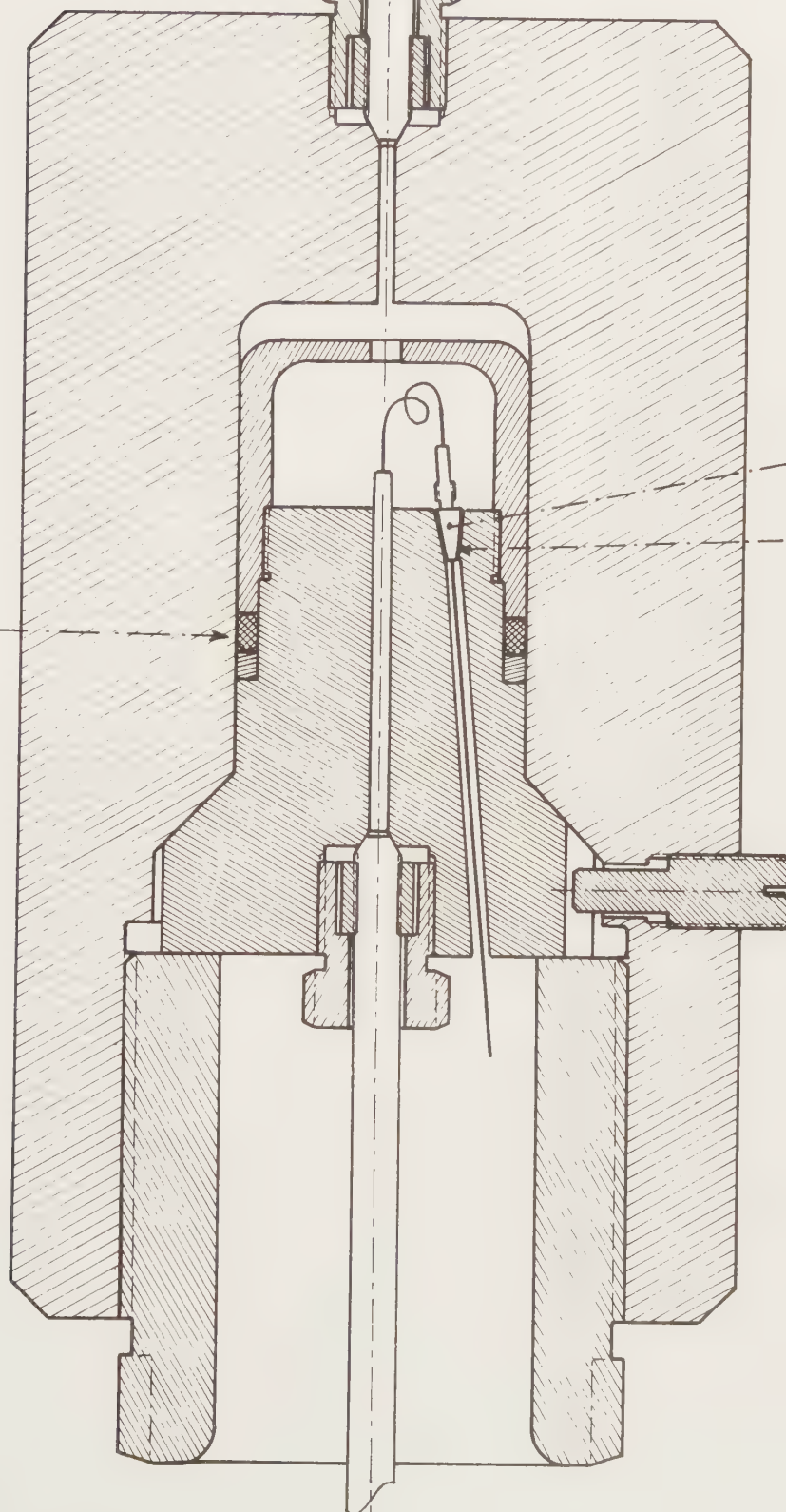
Entrée de courant

nt argent

3

1 Passage
électrique

2. Gaine isolante



I-4- Protection -

Les divers appareillages sont fixés sur un bâti métallique autour de ce bâti sont fixés : sur l'avant, un panneau d'acier de 10 mm d'épaisseur destiné à protéger le manipulateur.

Sur le pourtour et au-dessus un treillis métallique très serré (rhino-band) dont le rôle est d'arrêter d'éventuels projectiles dûs à une improbable explosion du système, mais de laisser les gaz se détendre. Une porte coulissante en acier, permet l'accès à l'intérieur du blindage.

Les tubes servant à transmettre la pression sont fixés au treillis par des chaînes pour éviter qu'ils fouettent en cas de rupture.

III - Dispositif pour contraintes uniaxiales -

Il est extrêmement difficile d'exercer une traction ou une compression sur un échantillon de GaSb à cause de sa fragilité. De plus dans le cas d'une traction, les problèmes de fixation de l'éprouvette sont techniquement très délicats et augmentent considérablement les risques de rupture.

Nous avons par conséquent décidé d'appliquer une compression plutôt qu'une traction.

III-1- Cryostat pour compression jusqu'à l'azote liquide -

III-1-1- Principe de fonctionnement -

Il est schématisé sur la figure VI-6.

La charge qui est constituée par des cylindres d'acier inoxydable, calibrés, est suspendue par un fil souple à une tige. La tige sort du cryostat par un passage à vide, elle est filetée dans sa partie extérieure au cryostat de telle sorte qu'en tournant le bouton molleté elle s'élève ou s'abaisse. Le bouton molleté est dans un logement prévu dans l'étrier qui est solidaire du couvercle du cryostat.

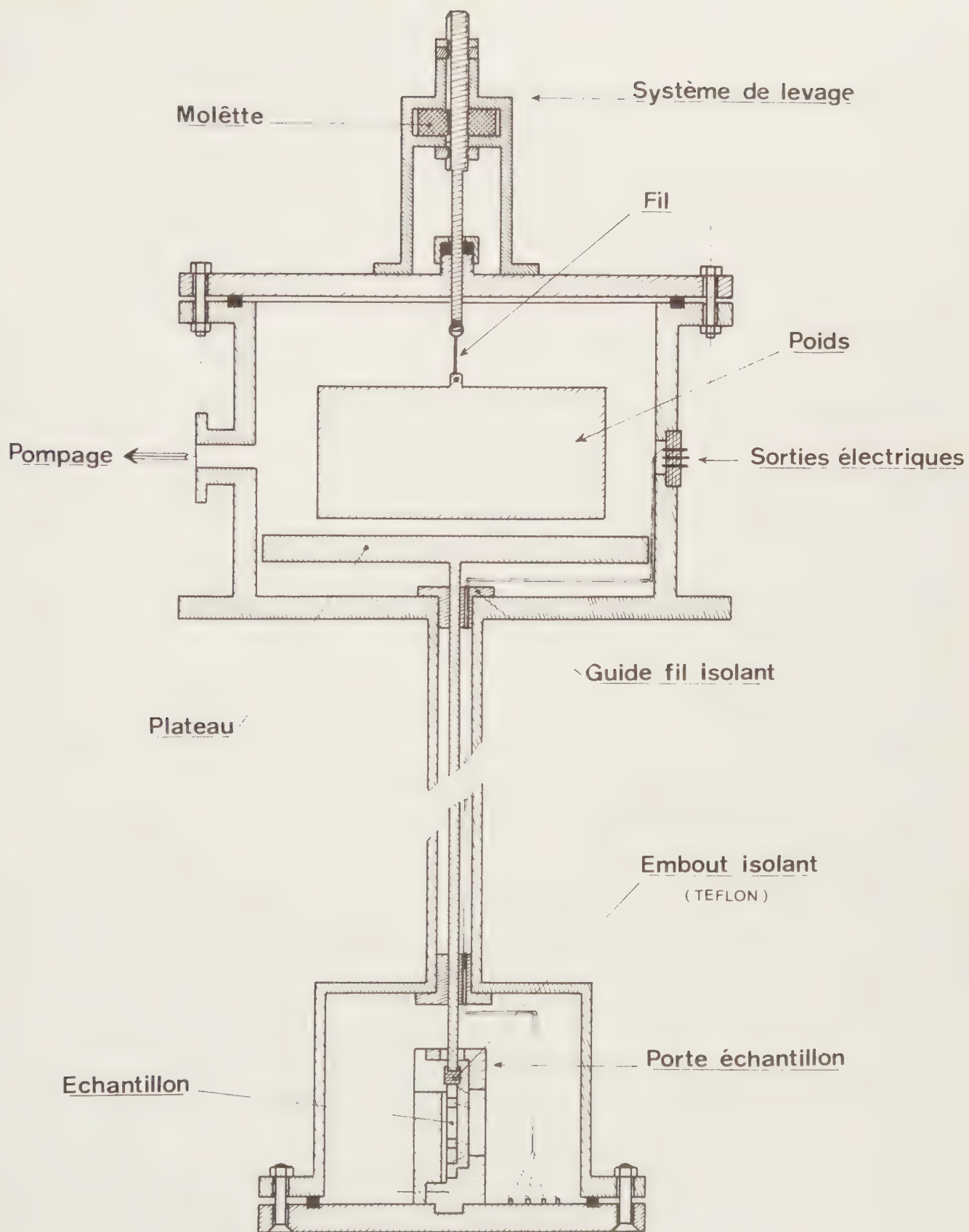


Fig: IV.6

Une rainure verticale a été pratiquée dans la tige au niveau de la partie filetée, cette rainure grâce à un guide empêche la tige de tourner. Elle a donc uniquement un mouvement de translation vertical.

Lorsque l'on veut appliquer une compression sur l'échantillon, on descend le poids qui vient reposer sur un plateau, lequel solidaire d'une deuxième tige, transmet l'effort à l'échantillon qui est situé sur son porte échantillon.

Le porte échantillon est centré par sa position sur l'embase du cryostat.

La tige qui transmet l'effort est centrée par deux guide-tiges et la partie supérieure du porte échantillon.

Dans les guides-tiges sont percées des ouvertures pour le passage des fils de courant et, de prise de tension, et des thermocouples ; les sorties électriques sont sur le côté.

Le pompage pour réaliser le vide à l'intérieur de l'enceinte se fait sur le corps, côté opposé aux sorties électriques.

III-2-1- Porte échantillon - (fig. VI-7)

Le porte échantillon est solidaire de la partie inférieure démontable du cryostat.

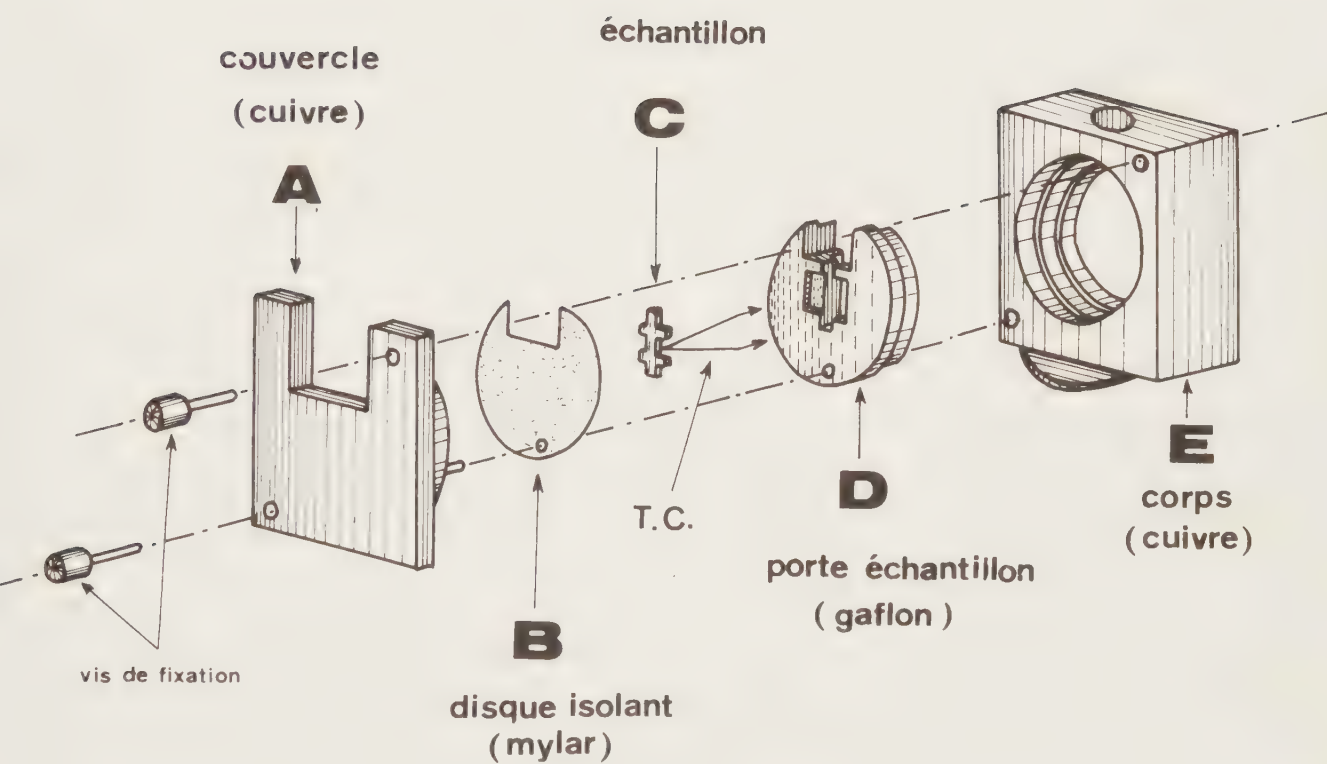
Il est constitué par un bloc de cuivre électrolytique de forme parallélépipédique, percé d'une ouverture circulaire à l'intérieur de laquelle vient se loger un disque de teflon portant l'empreinte de l'échantillon.

L'échantillon dans son logement est isolé électriquement du couvercle en cuivre rouge par une feuille de mylar de 50 Å d'épaisseur.

Le rôle du couvercle est d'assurer par son contact avec l'échantillon à travers le mylar, le refroidissement de l'échantillon. Il est lui-même refroidi par le corps.

La température est mesurée par un thermocouple cuivre-Or+2,11% atomes de cobalt, fixé sur l'échantillon.

Porte échantillon



IV-1- Circuit alimentation de l'échantillon - Fig. VI-8

Il est composé d'une alimentation stabilisée (1), d'un inverseur de courant 2 dont la bobine d'alimentation est commandée par le circuit mesure, d'un interrupteur 3, d'un fusible de protection de l'échantillon 4, d'un milliampèremètre indicateur de passage de courant 5, d'une résistance étalon thermostatée 6 aux bornes de laquelle on mesure la différence de potentiel pour obtenir l'intensité du courant passant dans l'échantillon 7, d'une résistance variable 8 permettant d'ajuster l'intensité du courant à la valeur désirée.

La température est mesurée par un thermocouple Cu-Au + 2,11% *Al Co* placé soit sur l'échantillon (contrainte uniaxiale) soit sur la cellule de mesures (pression hydrostatique).

Les contacts pour mesurer la différence de potentiel entre deux points de l'échantillon, sont pris sur les sondes latérales.

IV-II - Circuit de mesures -

Les trois différences de potentiel à mesurer (aux bornes de la résistance étalon, aux bornes de l'échantillon, aux bornes du thermocouple) sont envoyées sur un commutateur qui est utilisé pour présenter séquentiellement les signaux au voltmètre numérique. Il peut présenter un maximum de 20 signaux. La cadence de commutation la plus rapide est de 3 voies par secondes. D'autres cadences moins rapides peuvent être obtenues,

Le voltmètre numérique peut mesurer des tensions de 0 à 1000 volts avec une précision de $\pm 0,05\%$ du calibre ; sa sensibilité maximale est de 2,5 V. L'affichage se fait avec indication automatique de la polarité.

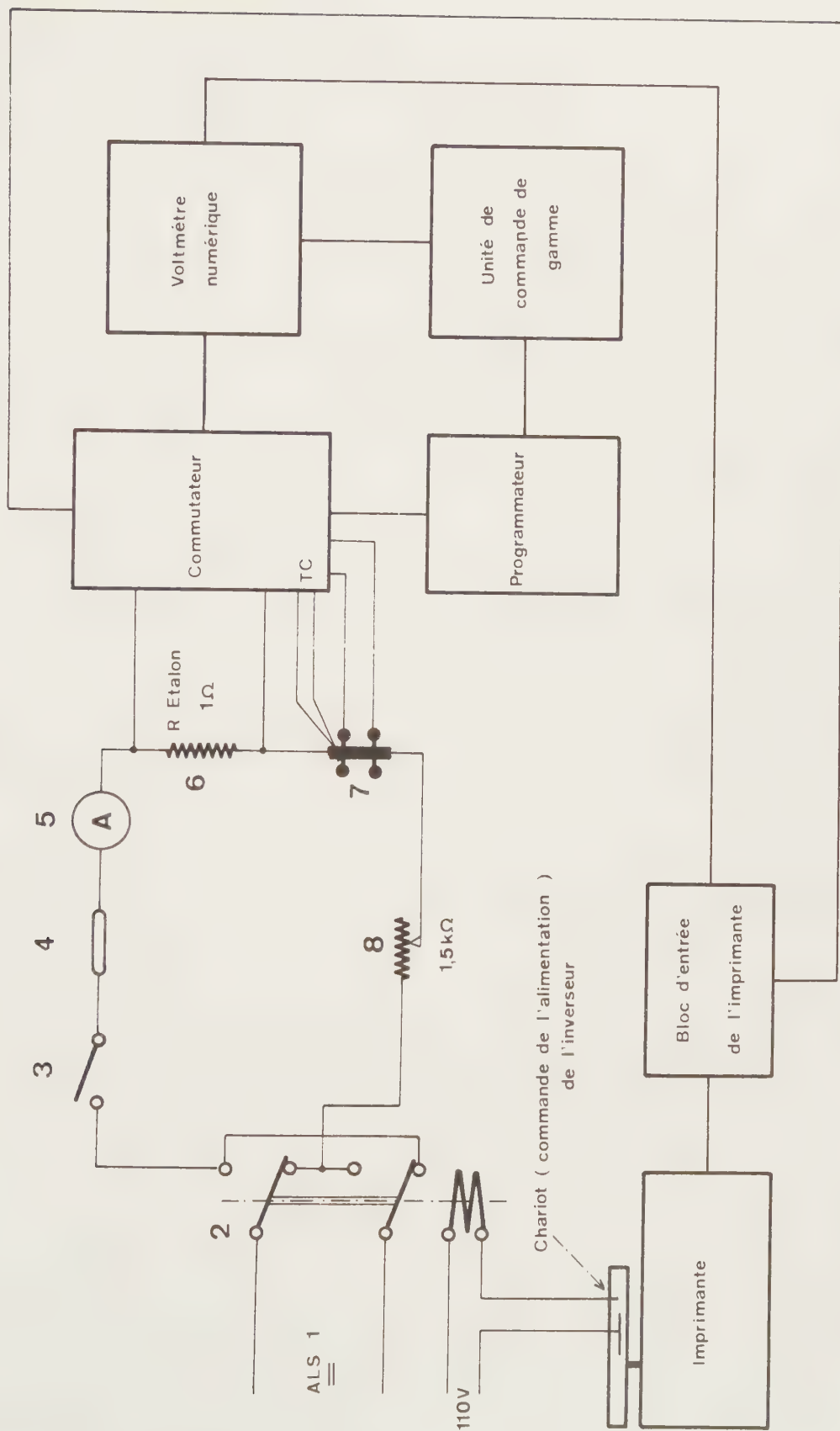


Fig: IV.8

La technique de mesure est la suivante : des impulsions sont créées en nombre proportionnel à la tension d'entrée, un compteur les enregistre pendant une durée déterminée et affiche ainsi une valeur correspondant à la tension d'entrée. L'appareil mesure la valeur moyenne du signal pendant 20, 40 ou 80 ms ; il se produit ainsi une réjection pour la fréquence 50 Hz et ses harmoniques. En raison du temps de comptage relativement long, la valeur moyenne des bruits de fréquence élevée tend à s'annuler.

Lors d'une commutation des entrées, l'unité de commande de gamme reçoit des ordres à partir du panneau de programmation. Selon le programme établi, les ordres correspondent à une gamme et à un multiplieur donné pour chaque voie. Les calibres que nous utilisons sont les suivants : 0-20 mV, 0-200 mV leur résistance d'entrée sont respectivement 50 M Ω et 500 M Ω et leur sensibilité 2,5 μ V et 25 μ V.

Le bloc d'entrée de la machine à écrire, permet d'effectuer une commutation continue. Il envoie une commande à la machine à écrire pour le retour du chariot en fin de ligne et une commande au commutateur.

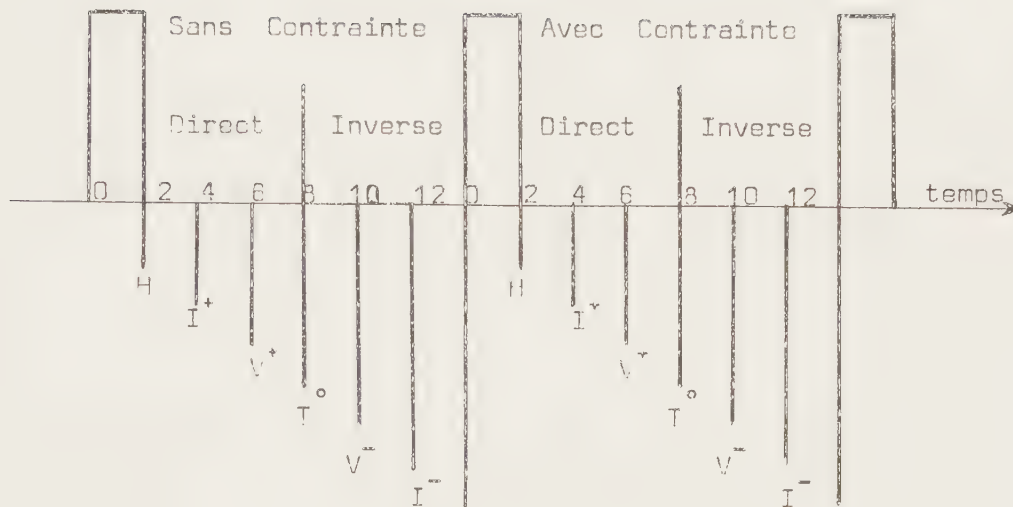
Le chariot de la machine à écrire lors de son déplacement commande l'alimentation de la bobine de l'inverseur de courant dans l'échantillon.

-IV-III- Mode opératoire-

Grace à ce dispositif pour les mesures électriques, nous pouvons opérer de la façon suivante .

-IV-3-1- Contrainte uniaxiale -

L'échantillon étant amené à la température de l'azote liquide au cours de la remontée nous effectuons les mesures suivantes :



IV-3-3 Pression hydrostatique-

La technique de mesure est un peu différente. Après une montée en pression, on met l'échantillon en température, et l'on effectue toute la remontée de température avec la pression, en décrivant des cycles de mesures identiques à celui du paragraphe IV-3-2.

Une fois la remontée terminée, on vide l'enceinte de l'échantillon, on remet l'échantillon en température et l'on recommence la remontée en température suivant le même processus mais sans pression.

V- DISPOSITIF POUR MESURES DE RESISTIVITE ET D'EFFET HALL-

Pour les mesures de résistivité et d'effet Hall, nous utilisons un cryostat à azote liquide classique à double enceinte. Un très bon vide d'isolement entre les deux enceintes permet des remontées en température lentes.

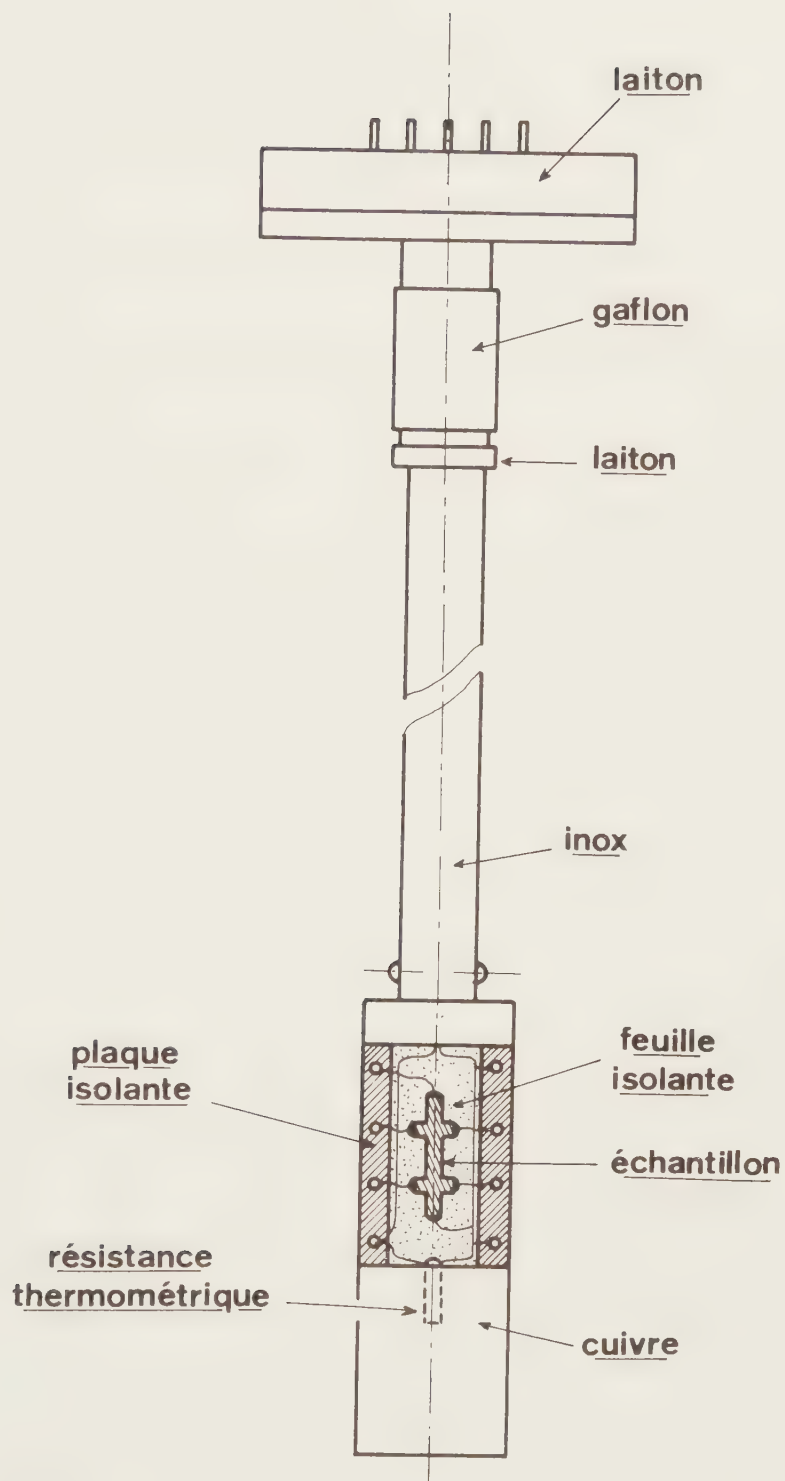


Fig:IV.9

V-1-2- Coefficient de Hall -

L'application du champ magnétique perpendiculairement au plan de la plaquette fait tourner les équipotentiellles qui ne sont plus normales au courant

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{E_y}{E_x} = \mu B$$

Nous avons défini le coefficient de Hall par la relation

$$E_y = R J_x B_z$$

Avant l'application du champ magnétique lorsque le courant est injecté en M et prélevé en O, N et P sont sur une équipotentielle.

Quand on applique le champ magnétique la différence de potentiel entre N et P est donc :

$$V_P - V_N = \frac{R_H I_{MO} B}{d}$$

D'où la valeur de R_H

$$R_H = \frac{(V_P - V_N) d}{I_{MO} B}$$

VI-5

C H A P I T R E - V I I -

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET INTERPRETATION

VII-1- RESULTATS EXPERIMENTAUX -

Nous donnons les résultats de mesures de conductivité, de constante de Hall, de piezorésistance sous pression hydrostatique et de piezorésistance sous pression uniaxiale, obtenus sur huit échantillons, entre 77 et 300°K. Ces échantillons ont été sélectionnés compte tenu de leur orientation cristallographique et de leur concentration en donneurs.

VII-1-1- Coefficients de piezorésistance :

Nous avons choisi 4 échantillons dont l'axe longitudinal coïncide avec la direction cristallographique $\langle 100 \rangle$: $L_{87} t_2 E_B - L_{90} t_1 E_B - L_{91B} t_3 E_A - L_{91A} t_2 E_A$. Ces quatre échantillons nous permettent, comme nous l'avons montré dans l'étude de la phénoménologie de la piezorésistance, de mesurer, lorsqu'ils sont soumis à une pression hydrostatique, le coefficient

$\Pi_p = \Pi_{11} + 2\Pi_{12}$ et lorsqu'ils sont soumis à une pression uniaxiale suivant leur grand axe, le coefficient Π_{11} .

Nous avons choisi également 4 échantillons dont le grand axe est orienté suivant la direction cristallographique $\langle 111 \rangle$: $L_{90} t_2 E_B$ - $L_{91A} t_3 E_B$ - $L_{91B} t_2 E_B$ - $L_{87} t_3 E_C$. Ils nous donnent Π_p lorsqu'ils sont soumis à une pression hydrostatique et $\frac{1}{3} (\Pi_{11} + 2\Pi_{12} + 2\Pi_{44})$ lorsqu'ils sont soumis à une pression uniaxiale suivant leur grand axe.

En remarquant que cette dernière expression peut se mettre sous la forme $\frac{1}{3} (\Pi_p + 2\Pi_{44})$ nous voyons que les premières séries de mesures nous permettront de calculer à partir des courbes obtenues Π_{12} , alors que par les deuxièmes séries de mesures nous pourrions calculer Π_{44} . Nous obtiendrons par conséquent les trois coefficients indépendants du tenseur de piezorésistance : Π_{11} , Π_{12} et Π_{44} .

Les figures VII-1-2-3-4 donnent les variations des coefficients expérimentaux en fonction de la température pour les échantillons d'orientation $\langle 100 \rangle$.

Les variations de Π_{12} sont déduites des courbes interpolées de Π_{11} et Π_p les figures VII-5-6-7-8 représentent les variations des coefficients expérimentaux en fonction de la température pour les échantillons d'orientation $\langle 111 \rangle$. Les variations de Π_{44} étant obtenues à partir des courbes interpolées de Π_p et $\frac{1}{3} (\Pi_p + \Pi_{44})$.

Tous les coefficients de piezorésistance mesurés sous pression hydrostatique ont le même comportement : ils passent par un minimum quand la température varie.

Π_{44} commence par décroître quand la température augmente puis passe par un minimum et croît à nouveau légèrement aux environs de la température ambiante. Ce comportement de Π_{44} est général excepté pour l'échantillon $L_{87} t_3 E_C$ (Fig. VII-5) pour lequel à la température ambiante nous n'avons pas encore eu apparition du minimum.



Fig : VII -1



Fig : VII .2

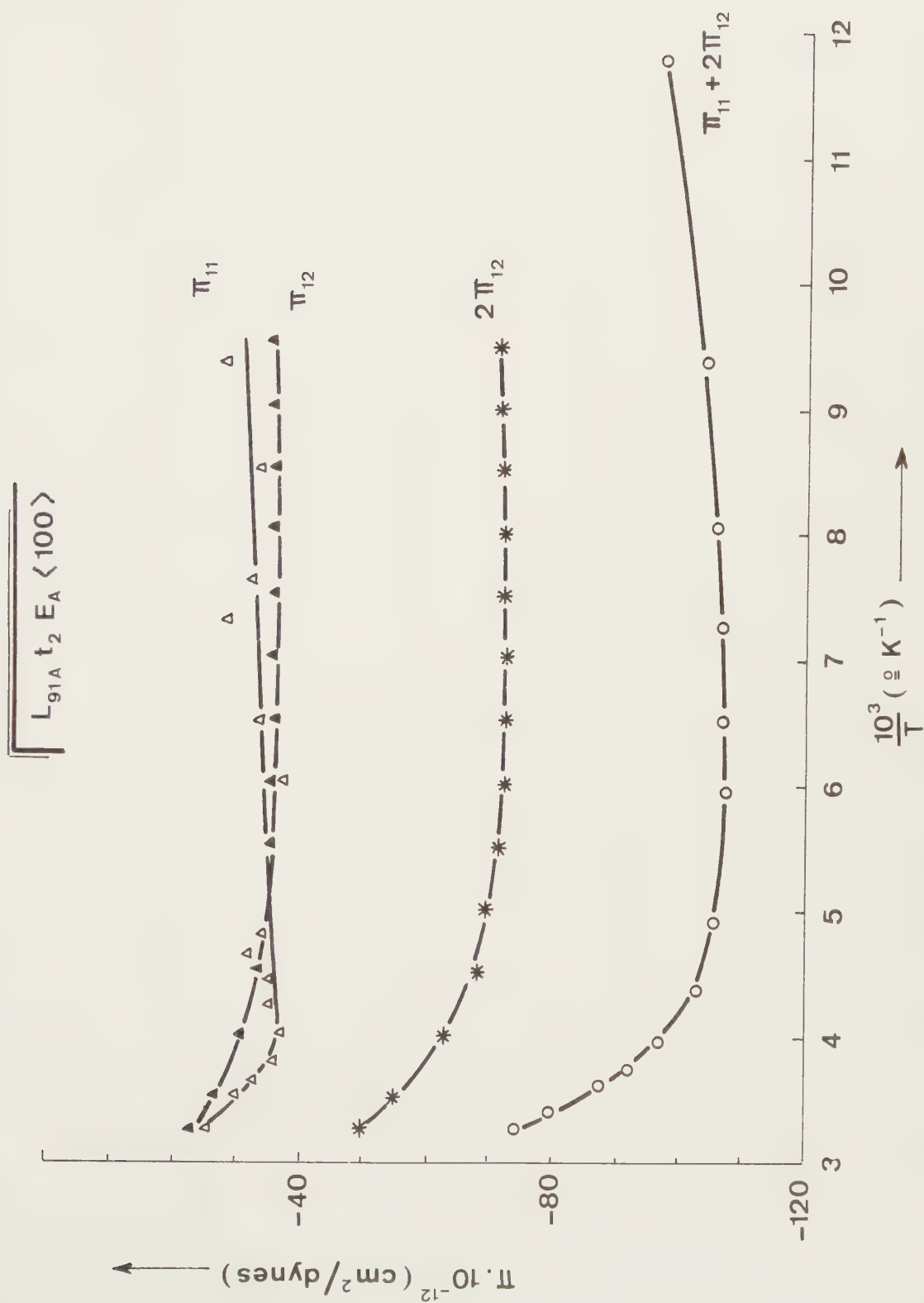


Fig : VII-3

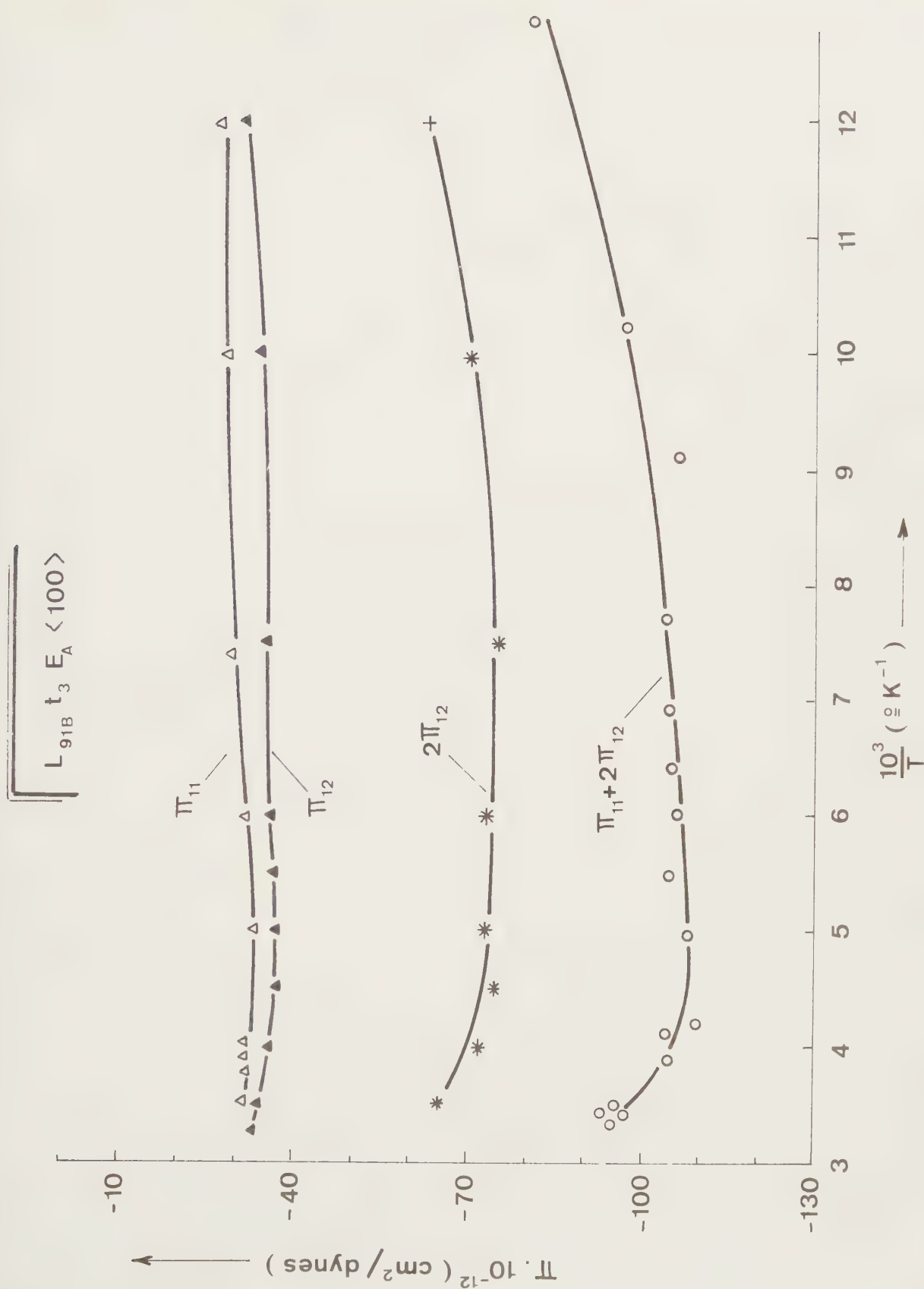


Fig : VII_4

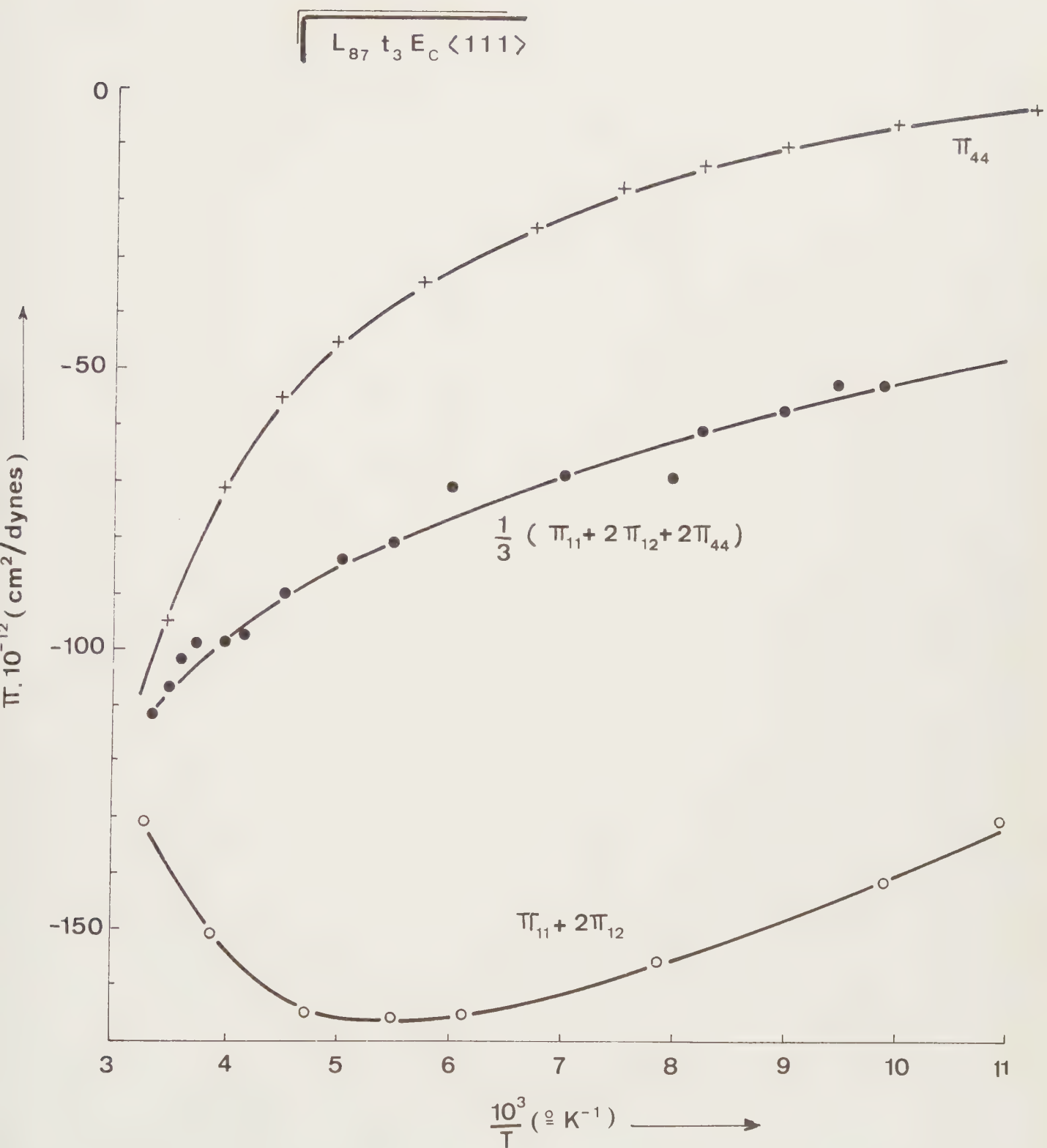


Fig: VII.5

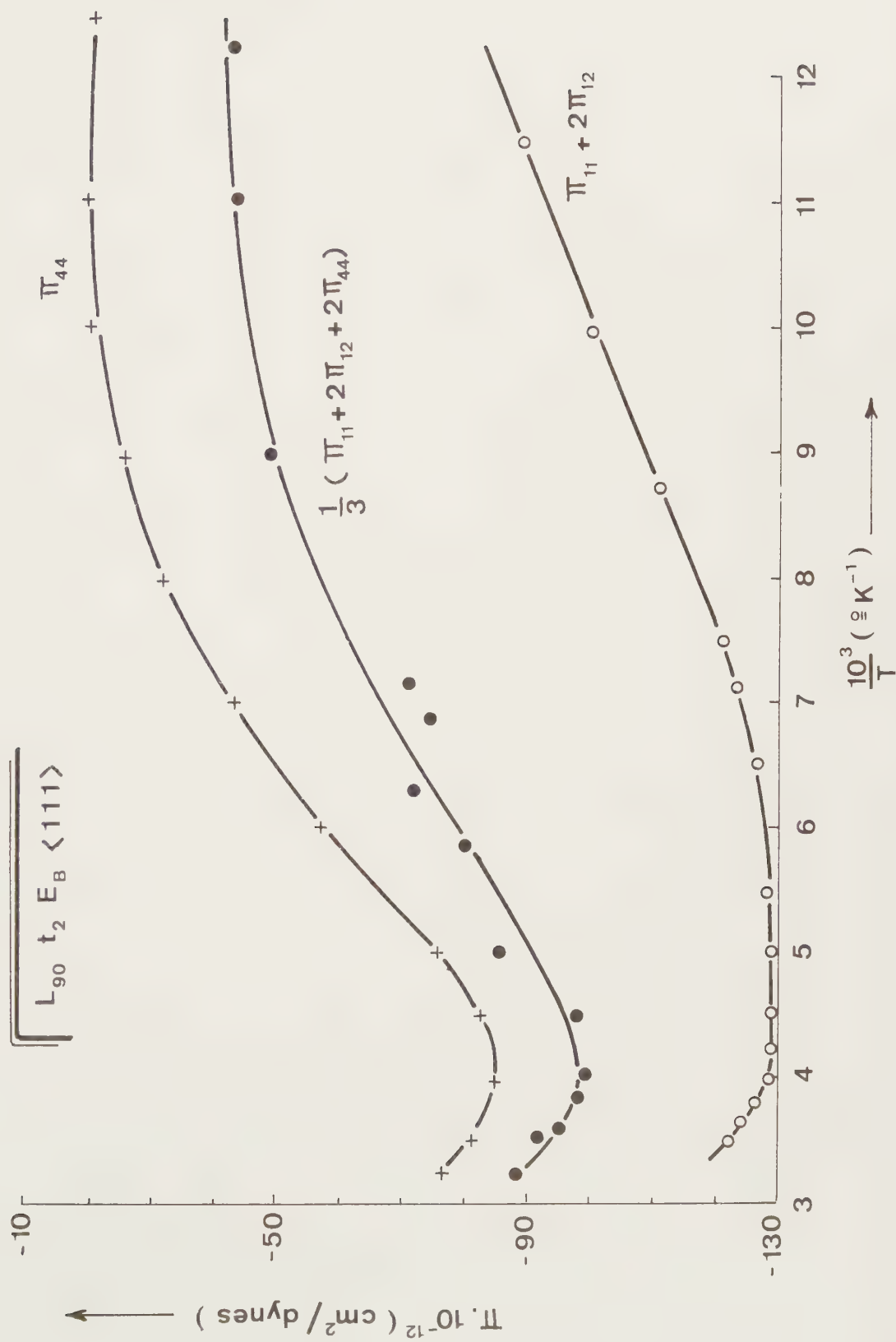


Fig: VII.6

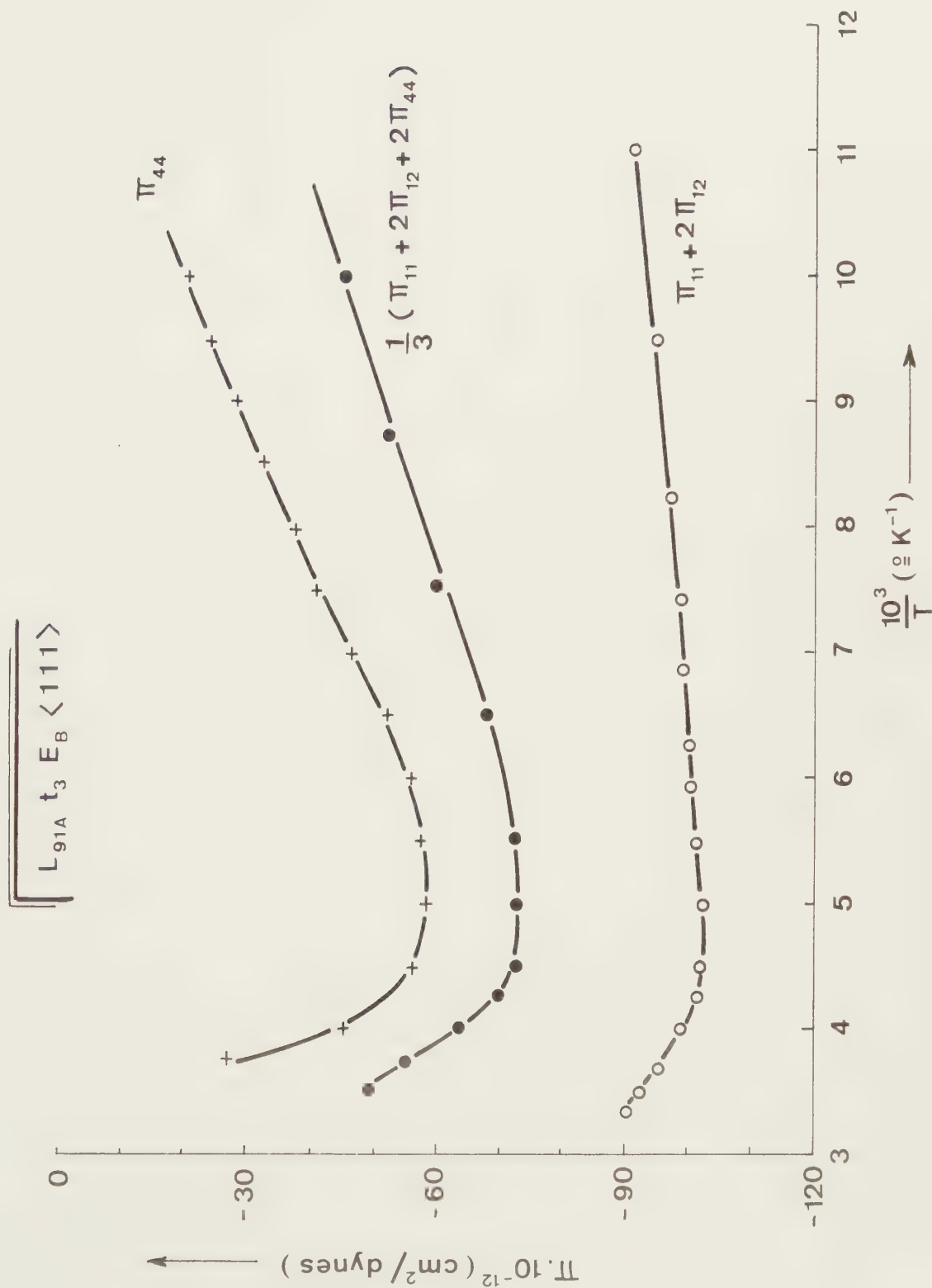


Fig : VII.7

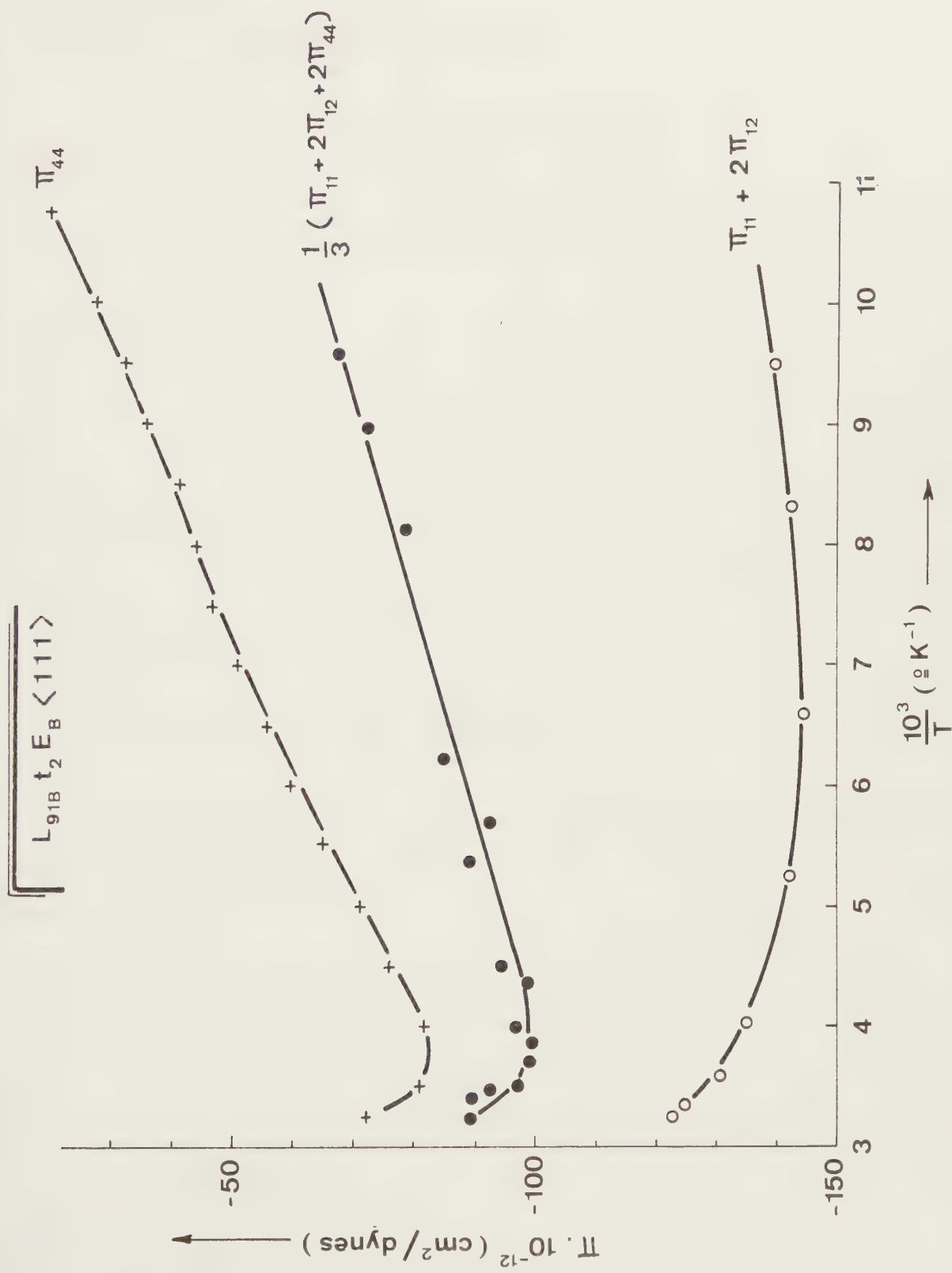


Fig: VII.8

VII-1-2- Constantes de Hall et conductivités :

Les valeurs expérimentales de R_H et σ sont représentées en fonction de la température, sur les figures VII (9-10-11-12-13-14-15-16).

Pour la détermination de R_H nous avons travaillé avec des champs magnétiques faibles : inférieur à 0,8 tesla, de telle sorte que l'approximation que nous avons faite dans l'étude théorique de l'effet Hall, à savoir : R_H indépendant de B , soit valable.

Tous nos R_H sont compris entre 2,5 et 10 ($10^{-6} \text{ m}^3/\text{cb}$) les conductivités sont comprises entre 0 et 11 ($10^{+4} \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$). Nous remarquons sur les figures VII(9..... 16) que R_H varie peu avec la température, et reste dans tous les cas du même ordre de grandeur, tandis que la conductivité décroît quand la température augmente. Les échantillons les plus dopés sont ceux qui présentent une constante de Hall faible et une conductivité importante.

En comparant avec les courbes de piezorésistance sous pression hydrostatique, on note que ce sont pour ces échantillons ayant la plus faible constante de Hall, que Π_p est le plus faible, et le minimum le moins prononcé.

VII-2- Interprétation des résultats :

Nous avons pour chaque échantillon quatre courbes en fonction de la température qui sont σ , R_H , Π_p et Π_s .

Nous avons vu dans le chapitre III que :

$$m_{\alpha\beta ij} = 3E_U \left[\frac{1}{kT} \left(\left\langle \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{g} \right) \right. \\ \left. - N_V \left\langle \frac{\langle \Delta E \partial \tau^{(i)} / \partial E^j \rangle}{\langle \Delta E, \tau \rangle} \cdot \frac{K_i^{(j)} K_j^{(i)}}{K^{(j)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} \right\rangle_{i,j} \right] \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*}$$

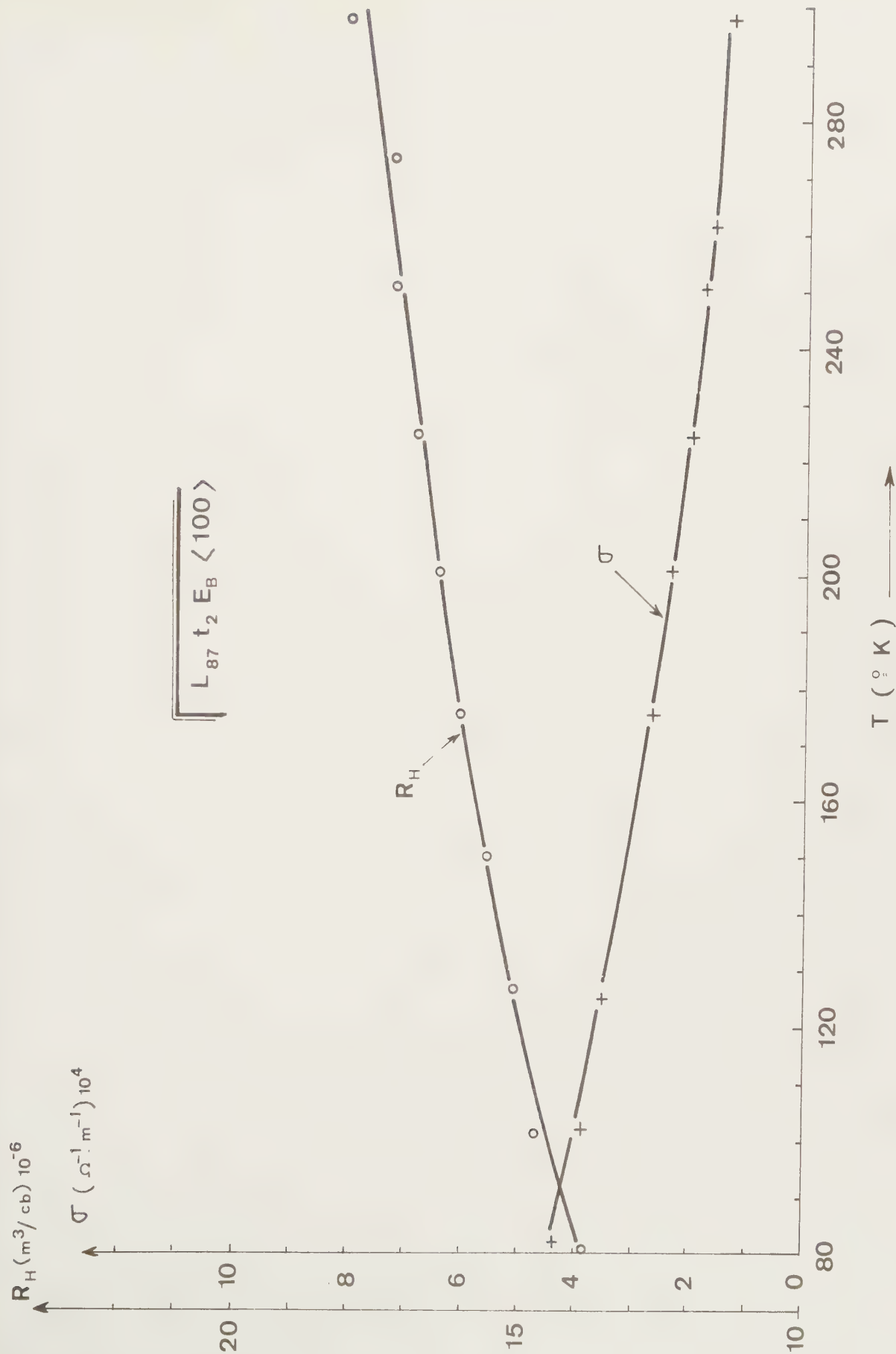


Fig: VII.9

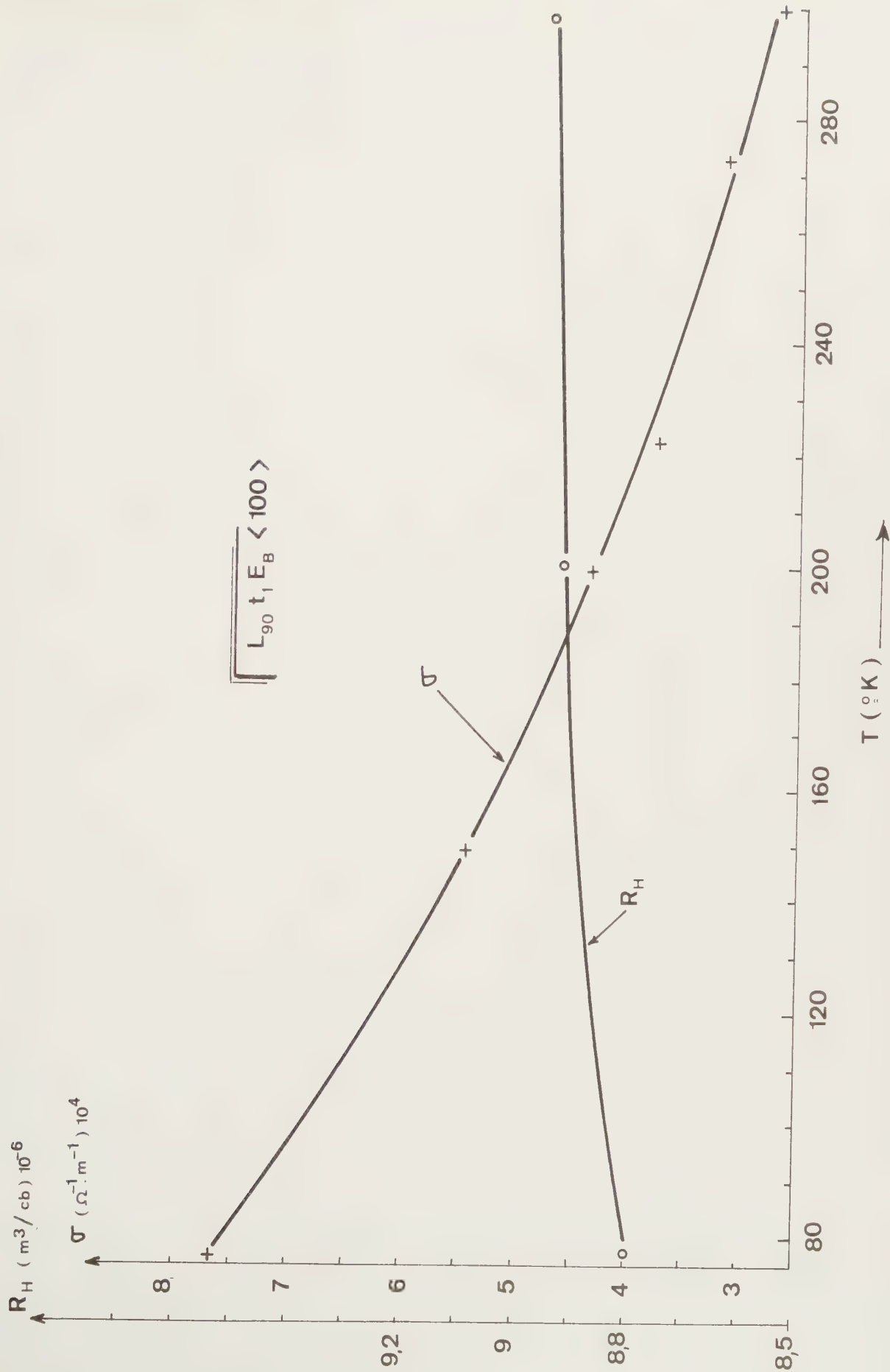


Fig: VII.10

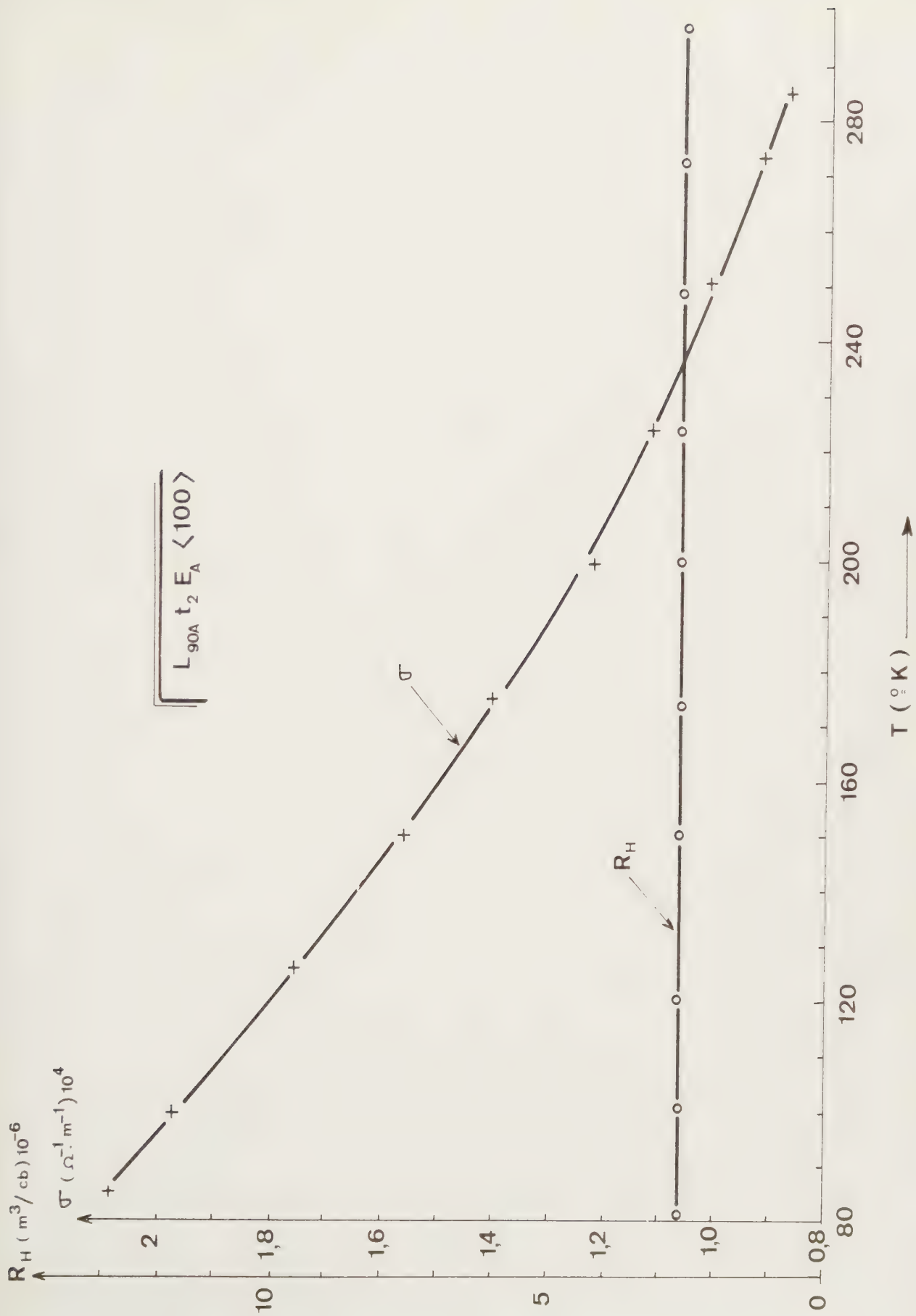


Fig : VII.11

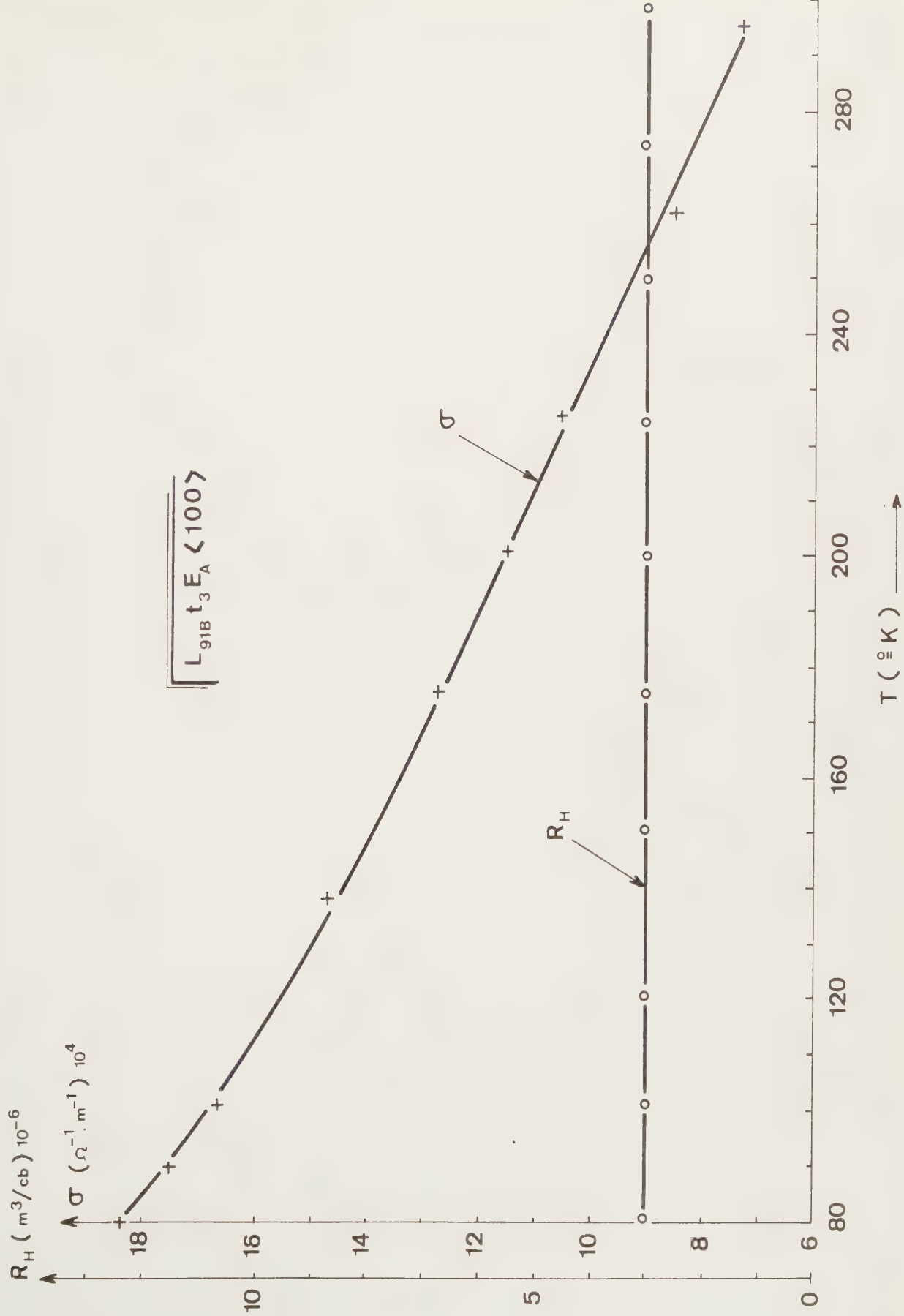


Fig: VII.12



Fig:VII.13

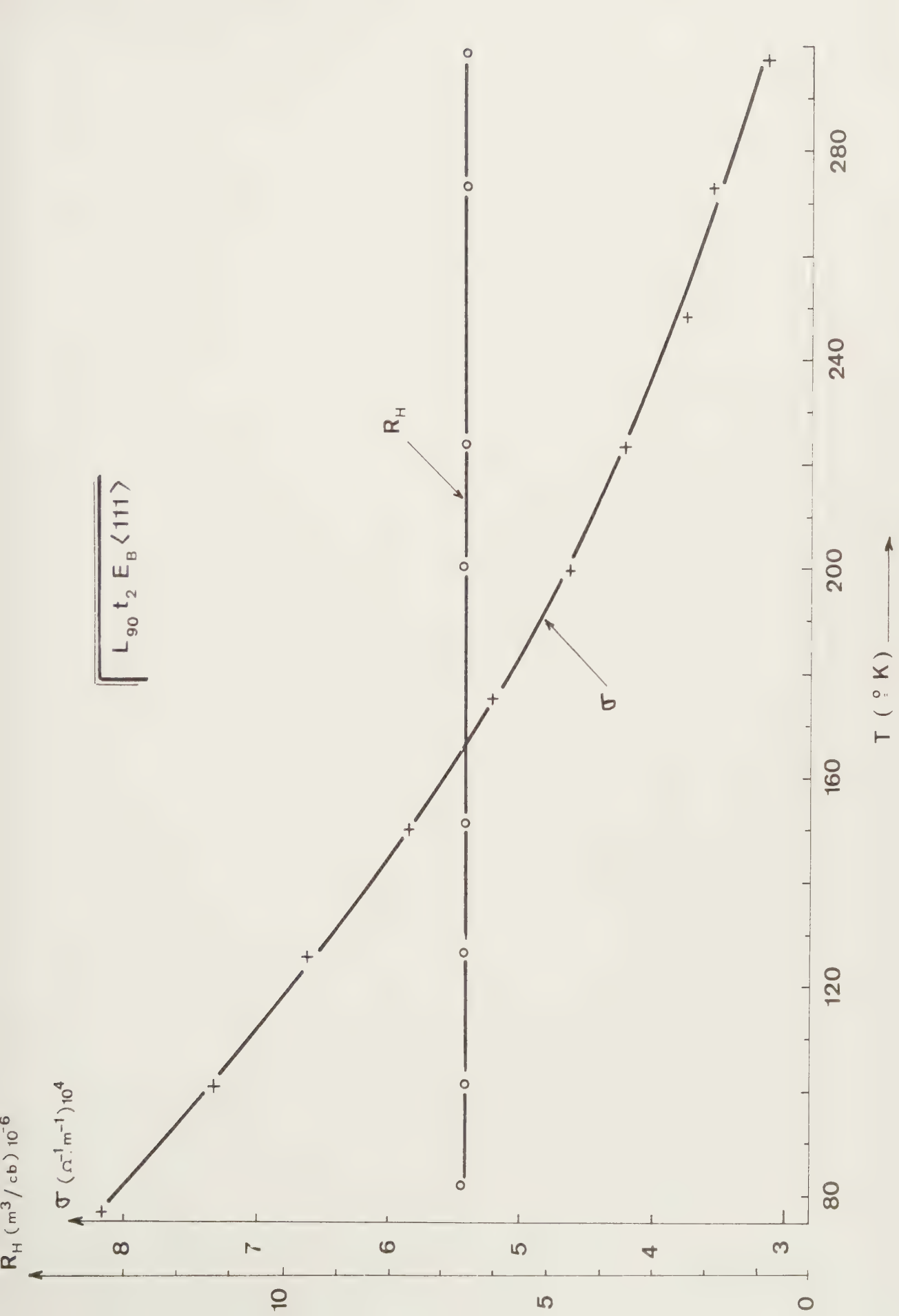


Fig: VII.14

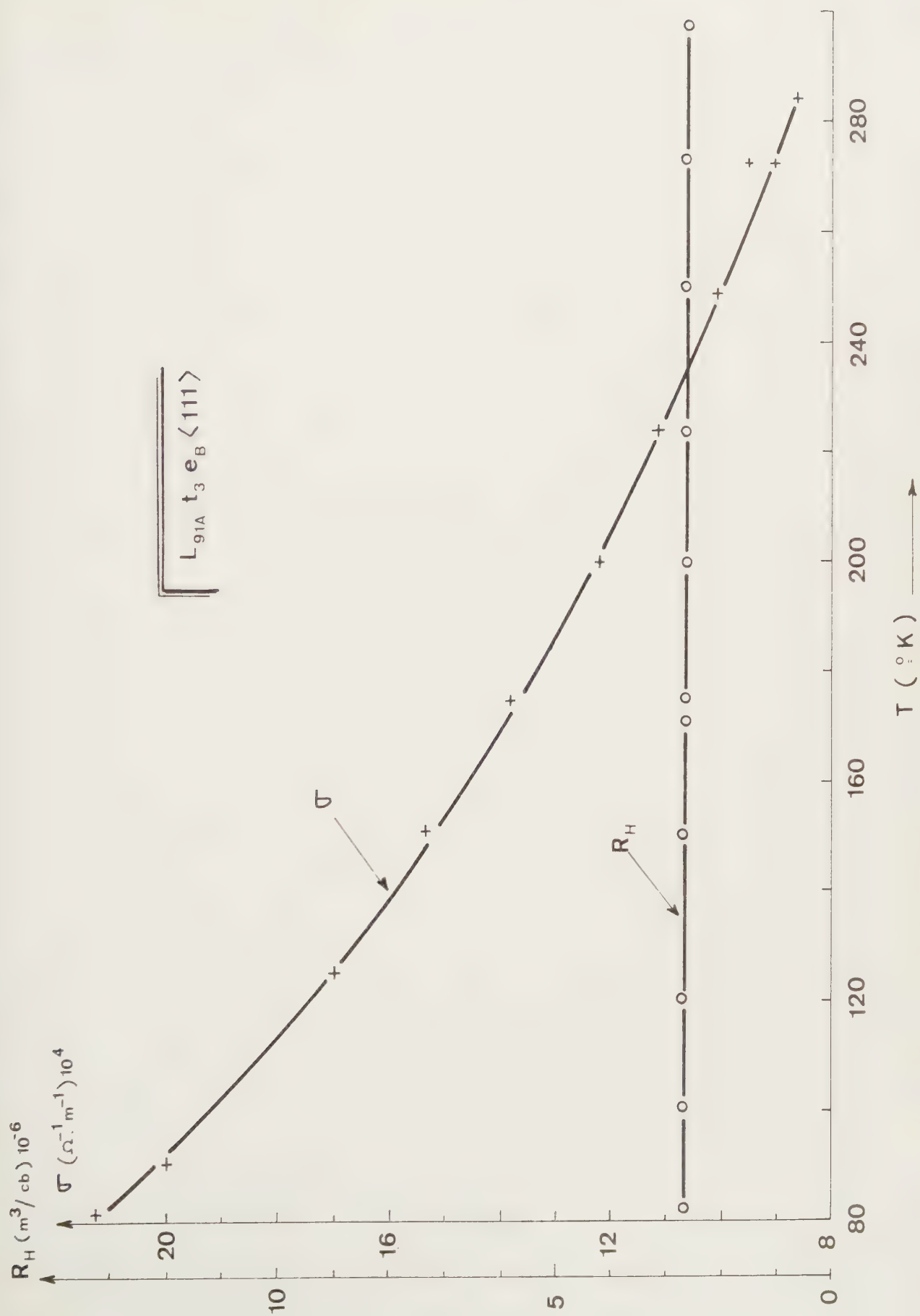


Fig: VII.15

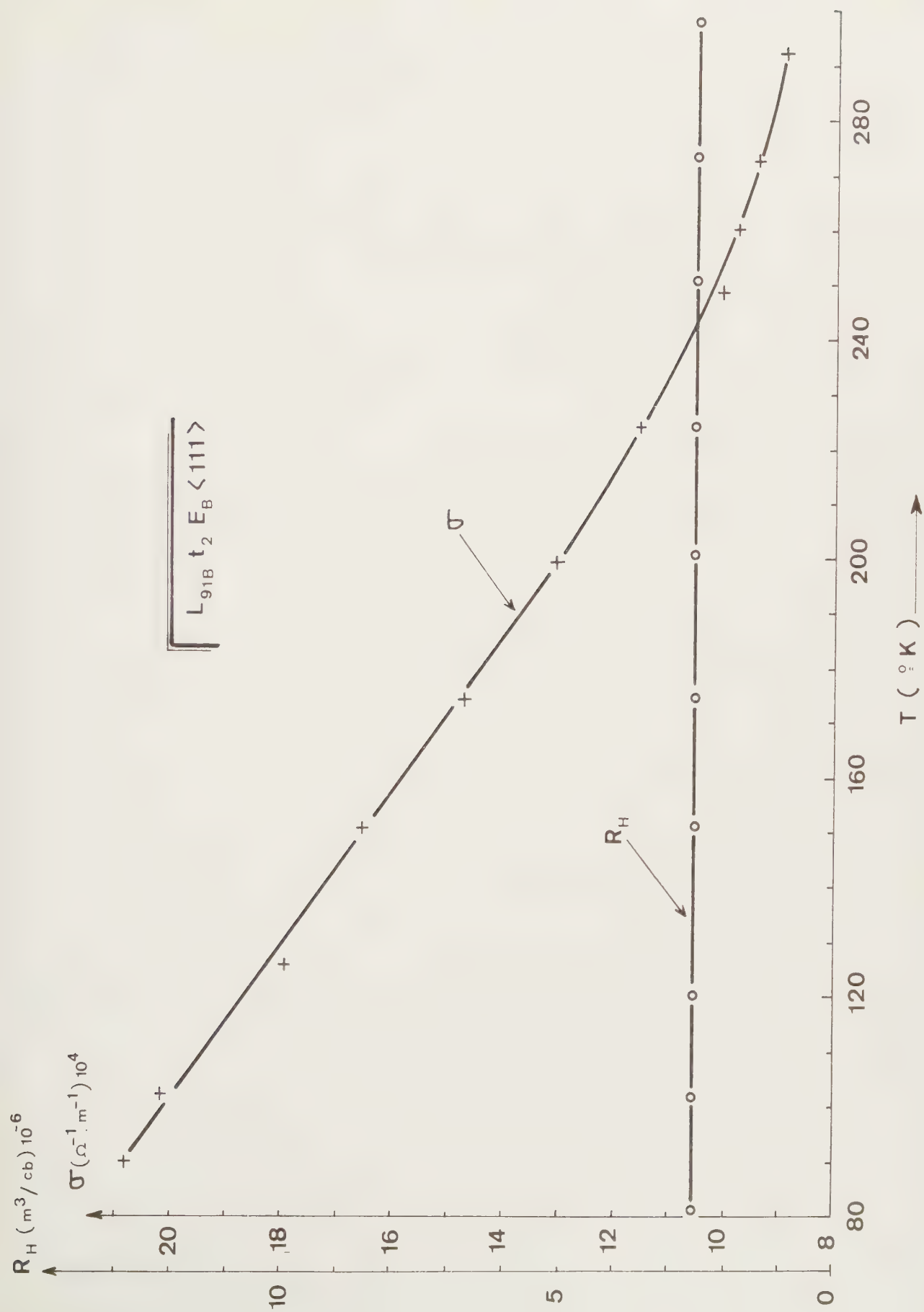


Fig: VII.16

Cette formule appelle les remarques suivantes :

a) L'élastorésistance est une fonction de l'anisotropie des masses effectives de la vallée

b) L'élastorésistance varie comme $\frac{1}{T}$ aux basses températures car il y a peu de phonons excités qui peuvent être absorbés et peu d'électrons avec une énergie suffisante pour émettre un phonon. Quand kT est supérieur à $\hbar\omega_{ij}$ (énergie d'un phonon diffusé d'une vallée i à une vallée j) $\frac{\partial \tau_i}{\partial E_j}$ varie avec ΔE et le deuxième terme de $m_{\alpha\beta ij}$ atténue sa dépendance avec T .

Aux très hautes températures lorsque le phonon est excité classiquement, m redevient proportionnel à T^{-1} .

En fait la condition $kT \gg \hbar\omega_{ij}$ n'est pratiquement pas atteinte dans le domaine extrinsèque, et des mesures d'effet acoustoélectriques montrent qu'à 300°K la variation de m due à la diffusion intervallée est de l'ordre de 1% (27) (37) (3). Donc nous pouvons prendre avec une bonne approximation

$$m_{\alpha\beta ij} = 3E_u \left[\frac{1}{kT} \left(< \frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} >_i - \frac{\partial_{ij} \partial_{\alpha\beta}}{9} \right) \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*} \right]$$

Dans le cas d'une bande multivallée dont les vallées sont sur des axes d'ordre 3 :

$$\frac{K_i^{(i)} K_j^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_\alpha^{(i)} K_\beta^{(i)}}{K^{(i)2}} = \frac{1}{9} \quad \text{pour chaque vallée}$$

Rappelons que m_{1212} s'écrit m_{44} dans la notation condensée utilisée au chapitre II.

Donc, pour m_{44} : $\partial_{ij} = \partial_{\alpha\beta} = 0$

$$m_{44} = \frac{\Xi_U}{3kT} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*}$$

De même pour $m_{1111} = m_{11}$ $\partial_{\alpha\beta} = \partial_{ij} = 1$

Donc $m_{11} = 0$

De même $m_{1122} = m_{12} = 0$

Dans le cas d'une bande multivallée dont les vallées sont sur des axes d'ordre 4

pour m_{44} $\partial_{12} = 0$ $\frac{K_1^{(i)} K_2^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_1^{(i)} K_2^{(i)}}{K^{(i)2}} = 0$ d'où $m_{44} = 0$

pour m_{11} $\partial_{11} = 1$ $\frac{K_1^{(i)} K_1^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_1^{(i)} K_1^{(i)}}{K^{(i)2}} > \frac{1}{3}$ d'où

$$m_{11} = \frac{2}{3} \frac{\Xi_U}{kT} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*}$$

Pour m_{12} $\partial_{11} = \partial_{22} = 1$ $\frac{K_1^{(i)} K_1^{(i)}}{K^{(i)2}} \cdot \frac{K_2^{(i)} K_2^{(i)}}{K^{(i)2}} = 0$ donc

$$m_{12} = -\frac{1}{3} \frac{\Xi_U}{kT} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*}$$

La dégénérescence statistique du gaz d'électrons réduit la piezorésistance et diminue sa dépendance avec la température. On pourrait reprendre la théorie en statistique de Fermi Dirac ; le seul changement consisterait à remplacer $\frac{1}{kT}$ par $\frac{\delta \ln n^{(s)}}{\delta E_F}$; ce changement affecterait nos résultats finaux de la façon suivante :

$$\text{vallées (111)} \quad m_{44} = \frac{\Xi_u}{3kT} \frac{m_1^* - m_2^*}{m_1^* + 2m_3^*} \frac{1}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \quad (\text{VII-1})$$

$$m_{11} = 0 \quad m_{12} = 0$$

$$\text{vallées (100)} \quad m_{44} = 0$$

$$m_{11} = \frac{2}{3} \frac{\Xi_u}{kT} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*} \frac{1}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)}$$

$$m_{12} = -\frac{1}{3} \frac{\Xi_u}{kT} \frac{m_1^* - m_3^*}{m_1^* + 2m_3^*} \frac{1}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)}$$

Or nous avons vu que l'on passait aisément de l'élastorésistance à la piezorésistance par la relation

$$m = \Pi : C$$

où C , est le tenseur des constantes élastiques

D'où nous tirons les relations :

$$\frac{1}{3} (m_{11} + 2m_{12}) = (\pi_{11} + 2\pi_{12}) (C_{11} + 2C_{12})/3$$

$$m_{44} = \pi_{44} C_{44}$$

VII-2

$$\frac{1}{2} (m_{11} - m_{12}) = (\pi_{11} - \pi_{12}) (C_{11} - C_{12})/2$$

L'existence d'un coefficient π_{44} non nul entre 77°K et 300°K sur les échantillons $L_{90} t_2 E_B - L_{91B} t_2 E_B - L_{87} t_3 E_C$ montre par conséquent qu'une bande multivallée, dont les vallées sont situées suivant les axes d'ordre 3, participe à la piezorésistance.

On constate par ailleurs sur les échantillons : $L_{87} t_2 E_B - L_{90} t_1 E_B - L_{91B} t_3 E_A - L_{91A} t_2 E_A$ que $\pi_{11} - \pi_{12} \approx 0$ et par suite que $\pi_{44} \gg \pi_{11} - \pi_{12}$ ce qui ne serait pas le cas si une bande (100) participait également à la conduction.

Enfin l'observation d'un coefficient isotrope π_p non nul dans le domaine de température étudié prouve l'existence d'un transfert d'électrons entre deux bandes de conduction comme nous l'avons montré au chapitre IV. Ces deux bandes ne peuvent donc être que les bandes (000) et (111).

Précisons que le π_{44} tracé sur les courbes VII-5,6,7,8 est obtenu expérimentalement à partir d'une mesure en contrainte uniaxiale et une mesure en pression hydrostatique, mesures pour lesquelles nous mesurons σ la conductivité totale

Rappelons que nous avons défini la piezorésistance comme

$$\pi = \frac{d\sigma}{\sigma} \frac{1}{K} \quad \text{c'est à dire que} \quad \pi_{44exp} \propto \frac{d\sigma}{\sigma} \frac{1}{K} \quad (\text{VII-3})$$

où K est le tenseur des contraintes.

Or dans le chapitre III nous avons considéré seulement la bande (111) dans l'étude théorique du coefficient de cisaillement, de telle sorte que pour cette bande nous avons :

$$\Pi_{44} \propto \frac{d\sigma}{\sigma_2} \frac{1}{K} \quad \text{VII-4}$$

où σ_2 est la conductivité de la bande multivallée.
Compte tenu des équations VII-1,2,3,4 nous pouvons donc écrire :

$$\frac{E_u}{3kT} \frac{1}{C_{44}} \frac{K-1}{2K+1} \frac{1}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} = \Pi_{44} = \frac{\sigma \Pi_{44}}{\sigma_2} \exp \quad \text{VII-5}$$

Cette dernière équation est confirmée par le fait que $\Pi_{44} \exp$ diminue avec la température pour tendre vers de très faibles valeurs vers 77°K. Si la bande multivallée (111) se dépeuple aux basses températures au profit de la bande (000) d'énergie plus faible, la conductivité totale doit rester finie mais celle de la bande (111) décroît ce qui entraîne la diminution de $\Pi_{44} \exp$

Enfin il existe en pression uniaxiale, un autre phénomène, c'est la distorsion de la bande (000) due à la contrainte.

Nous pensons que cette anisotropie que nous introduisons ne peut pas avoir d'effet comparable aux transferts d'électrons dans une bande multivallée par exemple. Ceci revient à faire une hypothèse identique à celle que nous avons faite pour une vallée, c'est à dire que nous considérons que la bande (000) se déplace globalement le long de l'échelle des énergies, ceci est l'effet le plus important, les autres effets n'introduisant que des perturbations du 2ème ordre. Nous remarquons que tous les auteurs ayant travaillé sur des modèles semblables ont fait cette hypothèse Ex : SMITH¹⁷, KEYES²⁹, POLLAK³⁹ pour le germanium de type n, SAGAR⁽¹⁾ pour le GaSb de type n, BURKE⁽⁴¹⁾ pour le PbTe de type p.

Enfin le comportement de σ en fonction de T (représenté sur les figures VII-9... 16) ainsi que celui de R_H que nous avons pu observer sur des échantillons non cités dans ce travail ⁽⁴²⁾, pour lequel R_H croît avec T, confirme le modèle à deux bandes de conduction dont la plus élevée en énergie se peuple au fur et à mesure que T croît.⁴³ En effet la mobilité des électrons de la bande ayant l'énergie la plus élevée est plus faible que la mobilité des électrons ayant l'énergie la plus basse, on doit effectivement observer un tel comportement avec la température.

En conclusion de cette interprétation qualitative, nous pouvons donc dire que nos résultats confirment le modèle à deux bandes de conduction (000) et (111) qui a été proposé par SAGAR¹ pour le GaSb de type n.

III - EXPLOITATION DES RESULTATS -

III-1- Définition du problème -

Pour chaque échantillon, nous disposons des données expérimentales suivantes en fonction de la température :

conductivité : σ

coefficient de Hall : R_H

coefficient de piezorésistance isotrope : Π_p

pour les échantillons suivant $\langle 111 \rangle$, le coefficient de cisaillement : Π_s

Par ailleurs nous avons établi où nous connaissons un certain nombre de relations entre les données expérimentales et les paramètres définissant les caractéristiques des deux bandes,

Population

$$n_1 = \frac{4\pi}{h^3} (2kT)^{3/2} m_1^*{}^{3/2} F_{1/2}(\eta_1) \quad \text{VII-6}$$

$$n_2 = \frac{4\pi}{h^3} (2kT)^{3/2} m_2^*{}^{3/2} F_{1/2}(\eta_2) \quad \text{VII-7}$$

où m_1^* et m_2^* représentent les masses effectives de chaque bande. Rappelons que m_2^* est la masse effective de densité d'états de la bande 2 que l'on relie à la masse transversale et à la masse longitudinale des ellipsoïdes ainsi qu'un nombre d'ellipsoïdes par la relation

$$m_2^{* 3/2} = N_V^{3/2} m_T^* m_L^{* 1/2}$$

Rappelons enfin que la masse effective de conduction d'une telle bande est donnée par

$$\frac{1}{m_{2c}^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_L^*} + \frac{2}{m_T^*} \right]$$

Nous avons comme relations supplémentaires :

$$R_H = \frac{1 + \alpha b^2}{(1 + \alpha b)^2} \frac{1 + \alpha}{(n_1 + n_2)} \quad \text{VII-8}$$

$$\sigma = e(n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2) = en_1 \mu_1 (1 + \alpha b) \quad \text{VII-9}$$

$$\sigma_2 = en_2 \mu_2 \quad \text{VII-10}$$

$$\mathcal{E}_p = \frac{d\Delta E}{dp} \frac{1}{1 + \alpha b} \left\{ \frac{\alpha b}{E_{g2}} \left(1 - \frac{1 + 4K}{1 + 2K} \right) + \frac{\alpha}{k T} \frac{1}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}} \right\}$$

$$\left[\frac{1-b}{2} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)} + \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{1/2}(n_2)} \frac{F_{-1}(n_1)}{F_0(n_1)} - \frac{F_{1/2}(n_1)}{2F_{1/2}(n_1)} \right. \\ \left. - b \left(\frac{F_{-1}(\eta_2)}{F_0(\eta_2)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{2F_{1/2}(\eta_2)} \right) \right] \left\{ - \frac{1}{E_{g1}} + \frac{\alpha b}{E_{g2}} \left[1 - \frac{1 + 4K}{1 + 2K} \right] \right\} \quad \text{VII-11}$$

$$\Pi_s = \frac{\varepsilon_u}{3kT} \frac{K-1}{2K+1} \frac{1}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} \frac{1}{C_{44}} \frac{\sigma_2}{\sigma} \quad \text{VII-12}$$

Equations dans lesquelles :

- les indices 1 et 2 caractérisent respectivement la bande (000) et (111)

$$\alpha = \frac{n_2}{n_1} \quad b = \frac{\mu_2}{\mu_1} \quad K = \frac{m_L^*}{m_T^*}$$

$$\eta_1 = \frac{E_F - E_{C1}}{kT} \quad \eta_2 = \frac{E_F - E_{C2}}{kT}$$

η_1 et η_2 sont donc bien évidemment liés par la relation :

$$\eta_2 = \eta_1 - \frac{\Delta E}{kT} \quad \text{VII-13}$$

Nous avons supposé, connus les paramètres de la bande (000) du GaSb, qui sont facilement accessibles et pour lesquels tous les auteurs donnent des valeurs concordantes, les grandeurs sont les suivantes :

$$m_1 = 0,047 m_e \quad (m_e, \text{masse de l'électron libre})$$

largeur de la bande interdite en K = (000) à la température de 0°K⁽⁴⁴⁾

$$(E_{g1})_{0^\circ K} = 0,813 \text{ eV}$$

Sa variation avec la température

$$\frac{dE_{g1}}{dT} = - 310^{-4} \text{ eV/}^{\circ}\text{K}$$

et avec la pression

$$\frac{dE_{g1}}{dp} = + 1,57 \cdot 10^{-7} \text{ eV/atm}$$

Enfin la valeur de C_{44} est également connue ()

$$C_{44} = 4,32 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$$

Il reste donc à déterminer

$$n_1, n_2, \mu_1, \mu_2, \Delta E, \frac{d(\Delta E)}{dp}, \frac{d(\Delta E)}{dT}, m_2^*, E_u, K$$

Ceci montre la nécessité de se fixer un certain nombre de paramètres supplémentaires si on veut résoudre la problème.

III-2- Méthode de calcul -

Nous choisissons dans un premier temps une valeur arbitraire de masse effective de densité d'état m_2^* et procédons de la manière suivante pour chaque échantillon. La procédure de calcul est développée ici pour l'échantillon $l_{g0} t_2 E_B$

A une température donnée, nous prenons ΔE comme variable et lui donnons un certain nombre de valeurs entre 0,030 et 0,120 eV. Pour chaque valeur de ΔE , à l'aide des équations VII-6 et VII-7, on peut alors mettre le rapport $\alpha = \frac{n_2}{n_1}$ sous la forme d'une fonction $f(n_1 \text{ et } n_2)$ de même que $(n_1 + n_2)$. Mais compte tenu du fait que

n_1 et n_2 sont liés par l'équation VII-13, ΔE est fixé on peut donc exprimer α et n_1+n_2 uniquement en fonction de la variable n_1 . Il est alors possible d'exprimer R_H (équation VII-8) en fonction de n_1 à condition de se donner arbitrairement b . Possédant la valeur expérimentale de R_H pour chaque température nous pouvons alors tirer n_1 de l'équation VII-8

Nous obtenons alors n_2 par l'équation VII-13 puis n_1 et n_2 grace aux équations VII-6 et VII-7. Ayant n_1 et σ d'une part, et la valeur expérimentale de σ d'autre part, b étant fixé, l'équation VII-9 donne μ_1 et par suite μ_2 puisque $\mu_2 = b\mu_1$

L'équation VII-10 nous permet alors de calculer σ_2 .

Remarquons que les équations VII-11 et VII-12 peuvent s'écrire

$$\Pi_P = \frac{dE_{g1}}{dp} \frac{1}{1+\alpha b} \left\{ - \frac{1}{E_{g1}} + \frac{\alpha b}{E_{g2}} \left(1 - \frac{1+4K}{1+2K} \right) \right\}$$

$$= (1+\alpha b) \left\{ \frac{\alpha b}{E_{g2}} \left(1 - \frac{1+4K}{1+2K} \right) + \frac{\alpha}{kT} \frac{1}{1+\alpha \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)}} \right\}$$

$$\left[\frac{1-b}{2} \frac{F_{-1/2}(n_2)}{F_{1/2}(n_2)} \frac{F_{1/2}(n_1)}{F_{-1/2}(n_1)} \frac{F_{-1/2}(n_1)}{F_{1/2}(n_2)} \left(\frac{F_{-1}(n_1)}{F_0(n_1)} - \frac{F_{-1/2}(n_1)}{2F_{1/2}(n_1)} \right) \right. \\ \left. - b \left(\frac{F_{-1}(n_2)}{F_0(n_2)} - \frac{F_{-1/2}(n_2)}{2F_{1/2}(n_2)} \right) \right] \Bigg\}^{-1} \quad \text{VII - 14}$$

$$\text{et} \quad C_2 = 6 \pi_s C_{44} kT \frac{F_{1/2}(\eta_2)}{F_{-1/2}(\eta_2)} \frac{\sigma}{\sigma_2} \quad \text{VII-15}$$

Dans lesquelles nous avons posé :

$$C_1 = \frac{d\Delta E}{dp} \quad \text{et} \quad C_2 = \varepsilon_u \frac{K-1}{2K+1}$$

Ayant la valeur expérimentale de π_s pour chaque température l'équation VII-15 donne par conséquent C_2

Par ailleurs si nous nous fixons le rapport $\frac{1+4K}{1+2K}$, tout est donné dans le deuxième membre de l'équation VII-14, π_p étant $\frac{1+2K}{1+4K}$ donné par l'expérience.

A ce stade de notre calcul nous avons alors fait l'approximation :

$$\frac{1+4K}{1+2K} \approx 2$$

Cette approximation est justifiée si l'anisotropie des ellipsoïdes est grande. Mais même si elle ne l'est pas, le terme en $\frac{\alpha b}{E_{g2}} (1 - \frac{1+4K}{1+2K})$ est petit devant le terme en $\frac{1}{E_{g1}}$ à cause du facteur b, il en est de même pour le terme

$$\frac{\alpha b}{E_{g2}} (1 - \frac{1+4K}{1+2K})$$

$$\text{devant le terme} \quad \frac{\alpha}{kT} \frac{1}{1 + \alpha \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)}} \left[\frac{1-b}{2} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} + \right.$$

$$\left. \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_{-1/2}(\eta_1)} \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} \left(\frac{F_{-1}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_1)}{2F_{1/2}(\eta_1)} \right) - b \left(\frac{F_{-1}(\eta_2)}{F_0(\eta_2)} - \frac{F_{-1/2}(\eta_2)}{2F_{1/2}(\eta_2)} \right) \right]$$

lorsque T est suffisamment élevé. En tout état de cause nous verrons si cette hypothèse peut être justifiée à posteriori.

Ce processus de calcul est schématisé sur le tableau synoptique suivant :

Finalement il nous est possible, pour chaque température, et pour chaque couple de valeurs de b et m_2^* , de tracer les courbes donnant C_1 et C_2 en fonction de ΔE

Ces courbes sont représentées par l'échantillon $U_{90} t_2 E_B$

avec	b = 0,17	et	$m_2^* = 0,30 m_e$	sur la figure VII-17
	b = 0,17		$m_2^* = 0,40 m_e$	" VII-18
	b = 0,17		$m_2^* = 0,50 "$	" VII-19
	b = 0,17		$m_2^* = 0,70 "$	" VII-20
	b = 0,20		$m_2^* = 0,70 "$	" VII-21
	b = 0,14		$m_2 = 0,70 "$	" VII-22

La suite de notre calcul repose alors sur l'hypothèse que $\frac{d\Delta E}{dp} = C_1$

et $E_u \frac{K-1}{2K+1} = C_2$ ne doivent pratiquement pas varier avec la température.

Cette double hypothèse nous semble raisonnable car la variation de $\frac{d\Delta E}{dp}$ avec T est une variation au deuxième ordre, alors que la variation de E avec T est une variation du premier ordre et est déjà petite. Le même raisonnement est valable pour E_u qui n'est pas autre chose qu'un déplacement en énergie lié à une déformation : nous considérons donc que C_1 et C_2 sont constants lorsque la température varie.

Si nous appliquons la condition $C_1 = Cte$ lorsque T varie sur la figure VII-19 par exemple, nous constatons qu'il y a une infinité de solutions pour $\Delta E = f(T)$: à chaque valeur de C_1 est associée une fonction $\Delta E = f(T)$ donnée, par l'intersection de l'horizontale correspondante avec les courbes $C_1 = f(\Delta E)$, et il en est de même pour C_2 .

Pour T donné

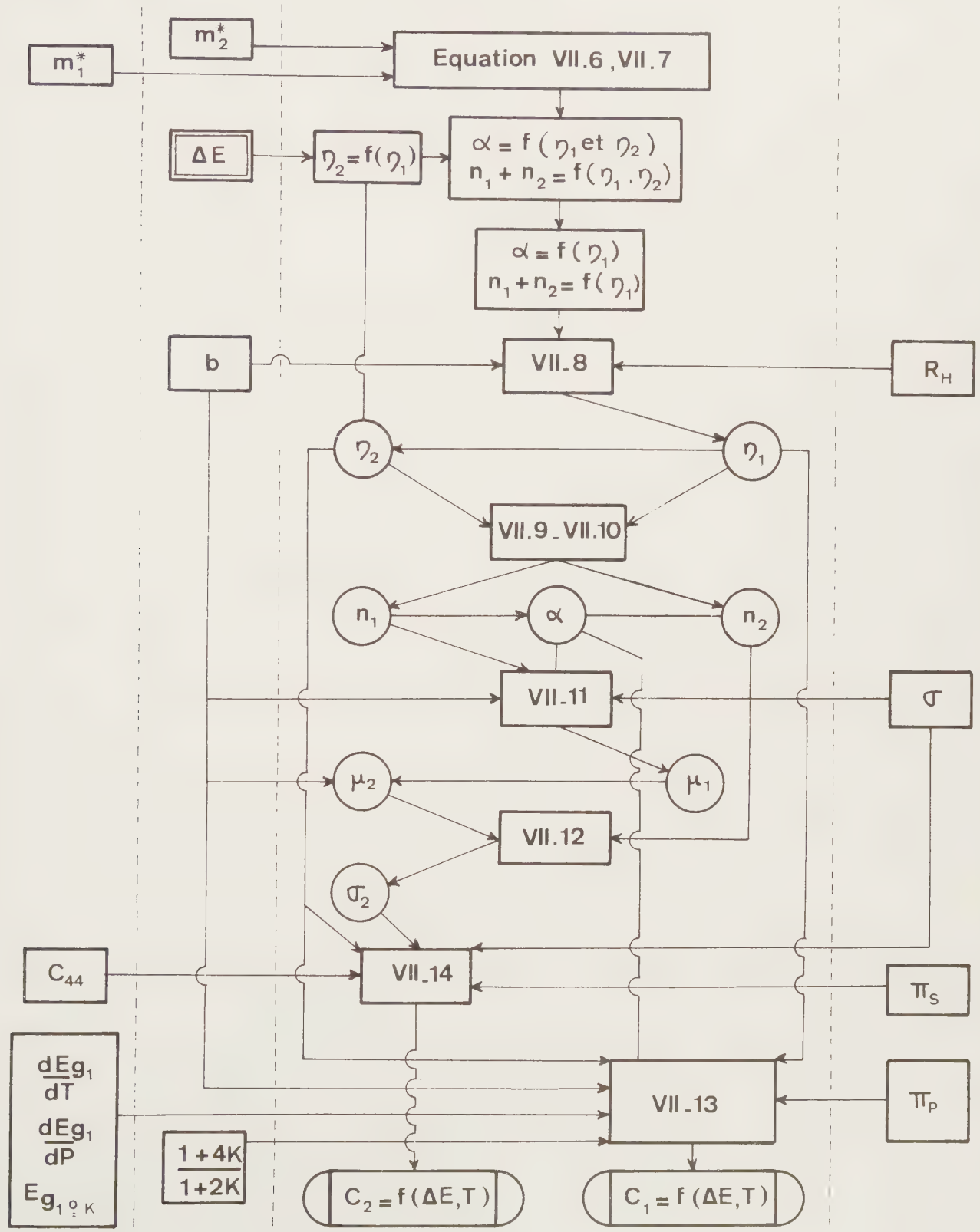
Résultats

données
connues

données
arbitraires

Calculs

données
expérimentales



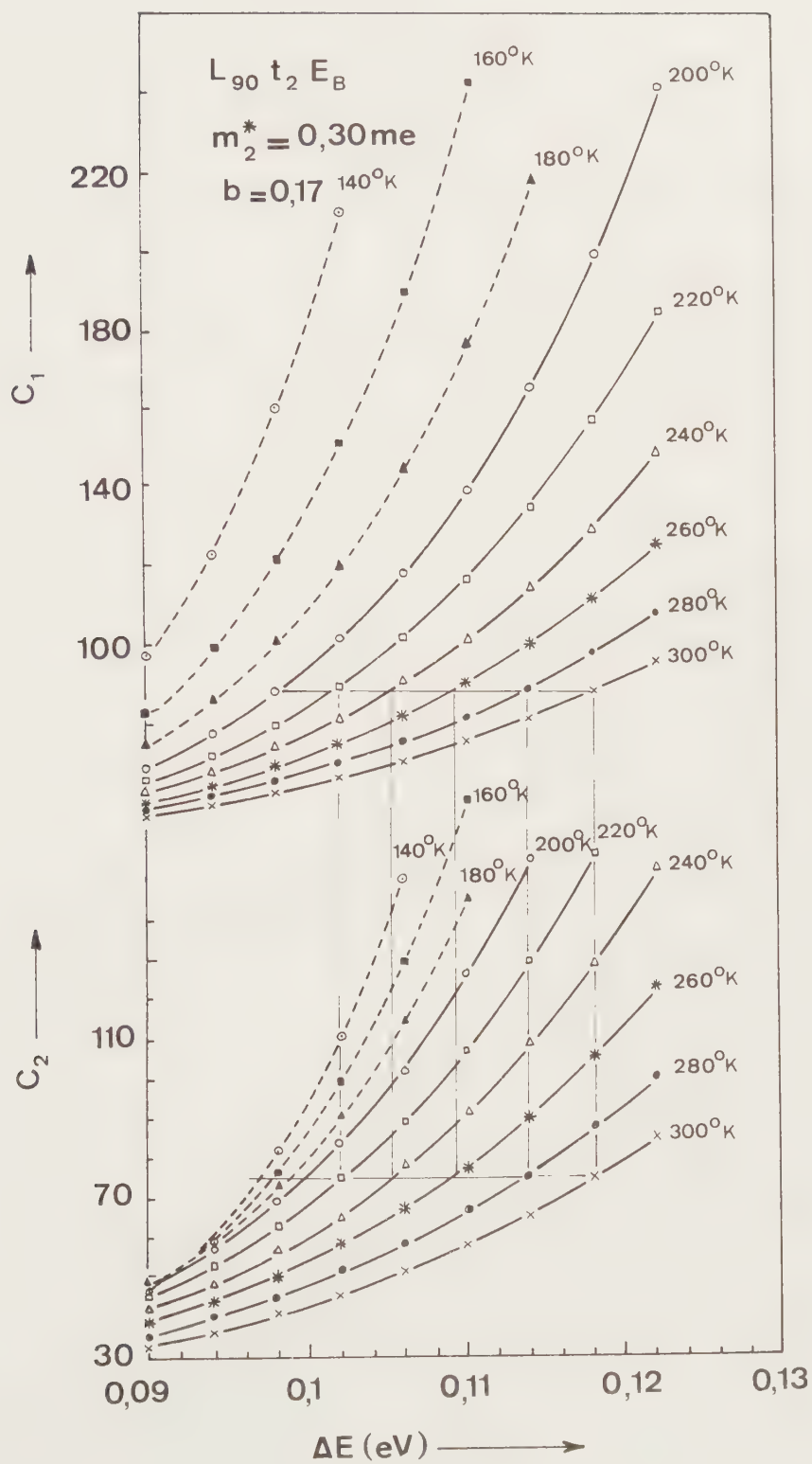


Fig : VII.17

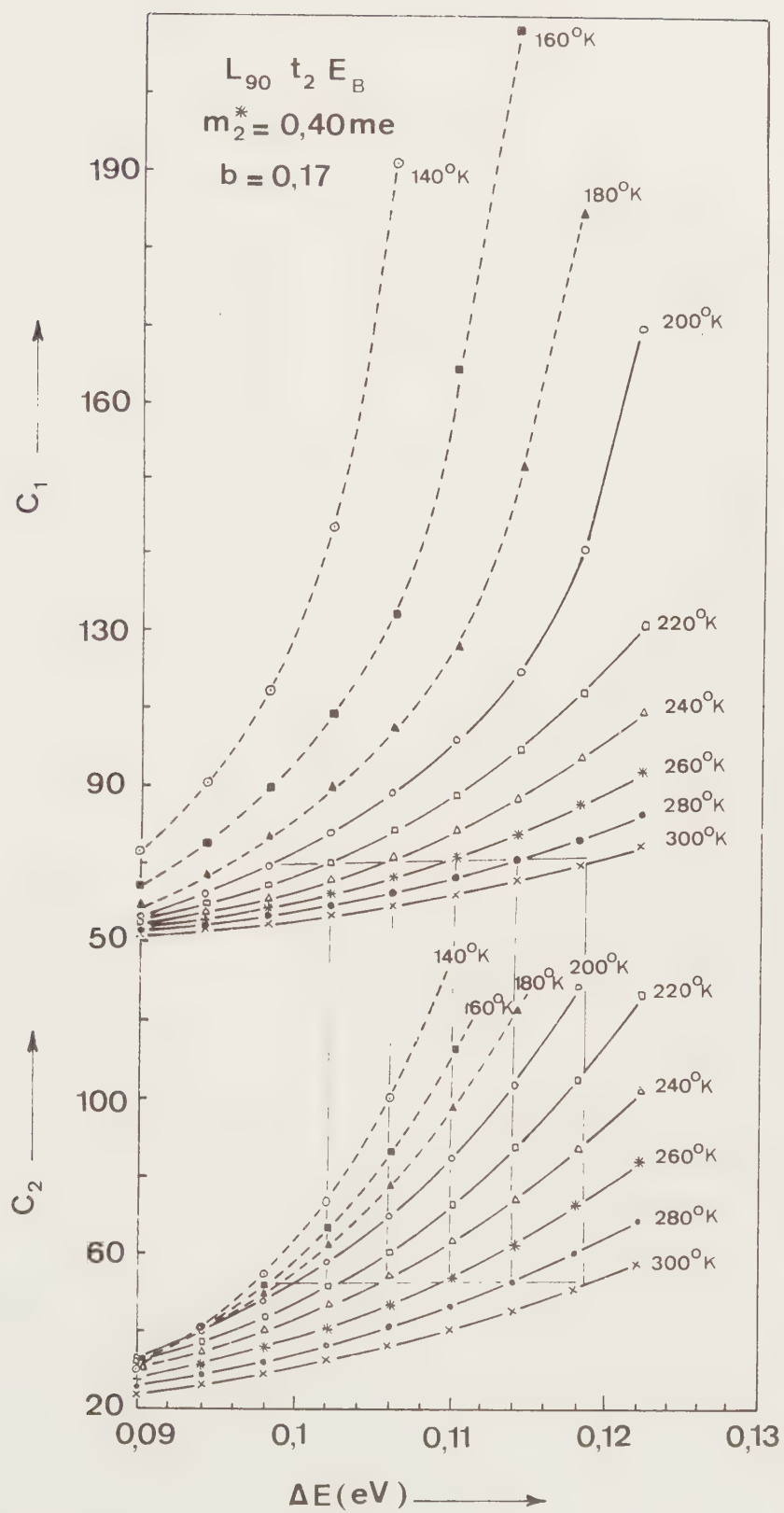


Fig : VII.18



Fig : VII.19

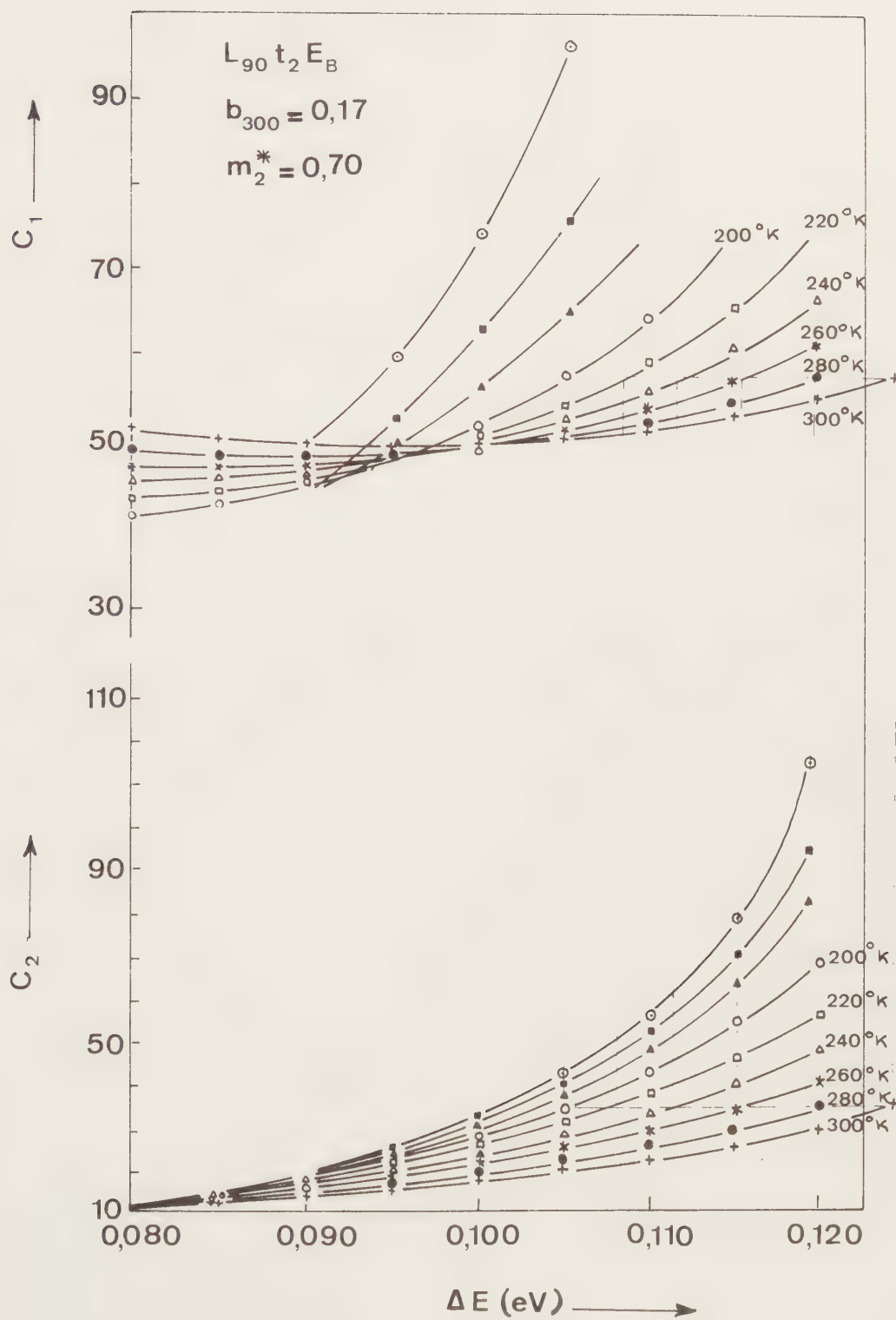


Fig :VII.20

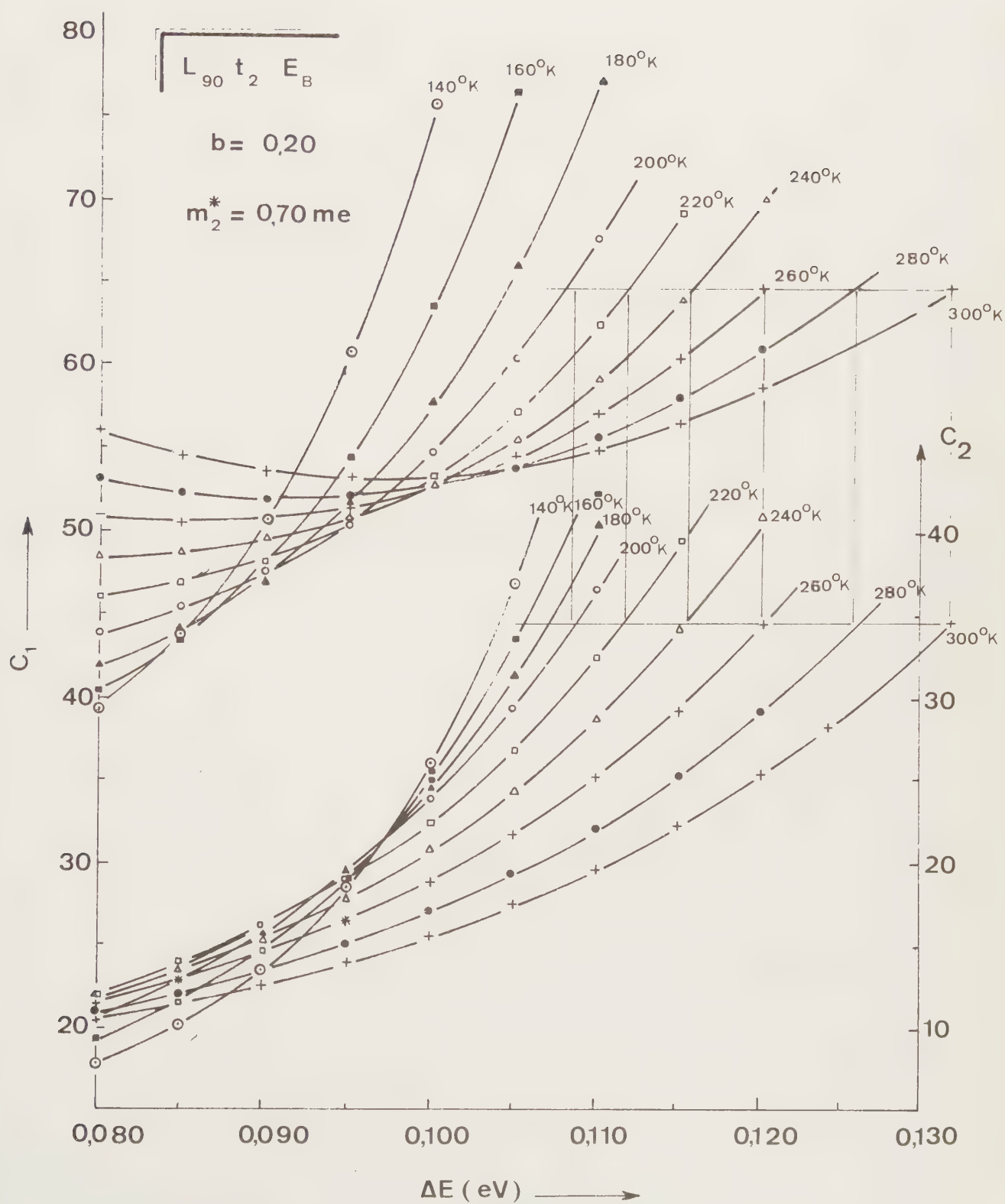


Fig : VII.21

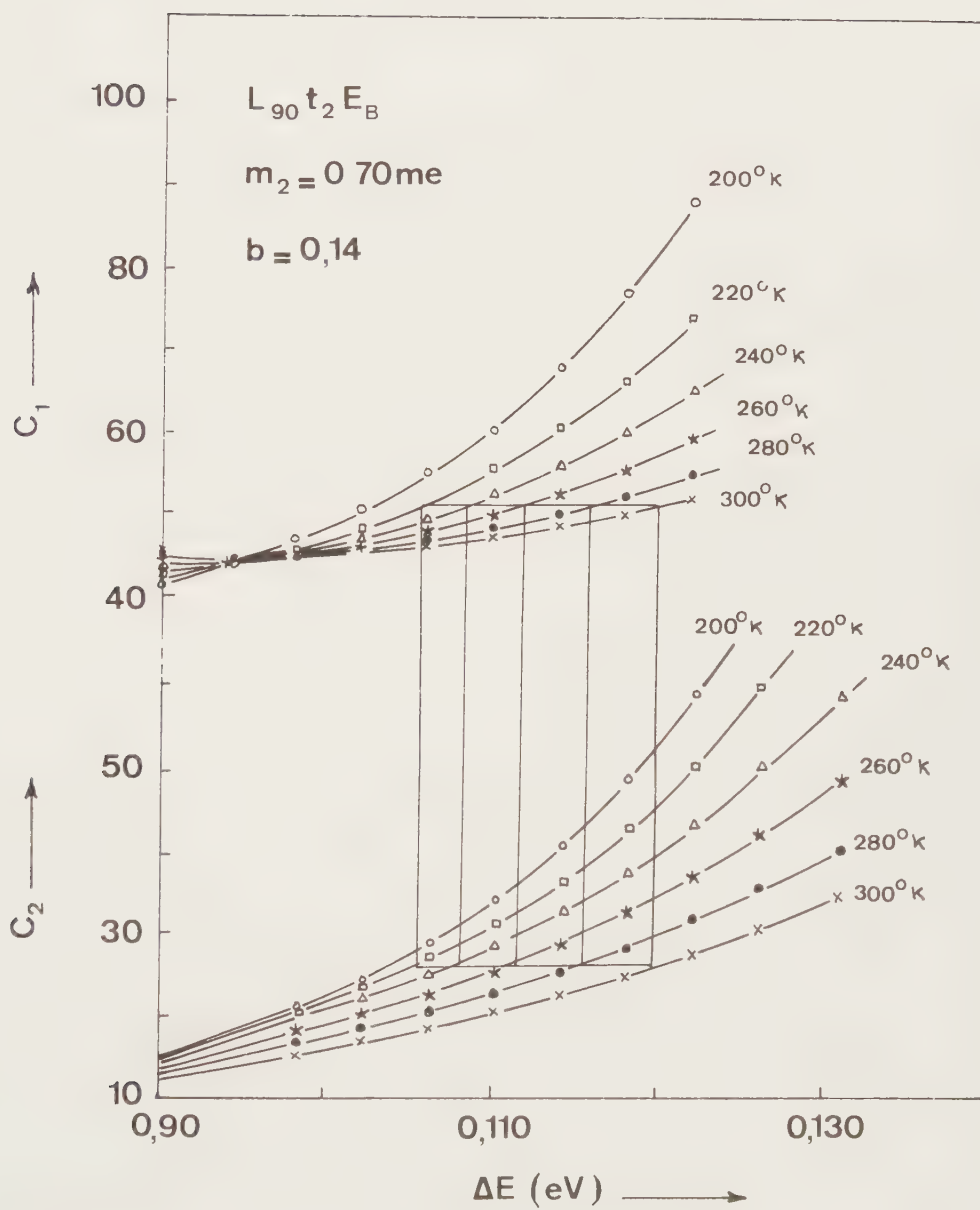


Fig : VII .22

Mais C_1 et C_2 doivent remplir une autre condition : ils doivent nécessairement donner la même loi de variation $\Delta E = f(T)$. Il nous faut donc trouver un couple d'horizontales, une pour C_1 et une pour C_2 , tel que les points de rencontre avec les isothermes $C_1 = f(E)$ et $C_2 = f(\Delta E)$ possèdent les mêmes abscisses ΔE pour un même T . Cette deuxième condition nous impose pour un b donné et un m_2^* donné une solution unique qui est représentée en particulier sur la fig. VII-19.

Sur la fig. VII-19 ainsi que sur les figures VII-20 et VII-21 nous voyons que nous ne pouvons pas avoir de solution en dessous de $\Delta E = 0,080$ eV, même en considérant C_1 seulement car une telle solution admettrait un ΔE qui diminuerait avec T et cela donnerait à 0°K , en extrapolant, un ΔE beaucoup plus faible que $0,08$ eV, valeur moyenne autour de laquelle tous les auteurs sont d'accord. L'absence de solution en-dessous de $0,08$ eV est encore plus évidente si l'on considère à la fois C_1 et C_2 .

Ajustement de b : Sur des échantillons comme $L_{30}t_2E_B$ où les bandes ne sont pas dégénérées puisque à 300°K le niveau de Fermi est situé entre les deux bandes près du bas de la première bande ($n_1 \approx 1$) nous ne pouvons pas faire d'hypothèse sur la dépendance de b avec T .

Nous constatons toutefois sur la fig. VII-19 ou VII-20 que si entre 300°K et 200°K , nous trouvons bien une solution $\Delta E = f(T)$ pour C_1 et C_2 , à partir de 200°K il n'y a plus concordance entre les ΔE obtenus pour C_1 et pour C_2 pris à la même température. Nous devons par conséquent ajuster b pour déplacer les isothermes de C_1 pour $T = 180^\circ\text{K}$, 160°K et 140°K vers la droite et les isothermes de C_2 vers la gauche jusqu'à ce qu'il y ait coïncidence des ΔE pour C_1 et C_2 pour les mêmes valeurs de T et b . Les résultats de cet ajustement sont représentés pour :

$b_{300} = 0,17$ sur la figure VII-23 pour $m_2^* = 0,70 m_e$ et VII-24
pour $m_2^* = 0,50 m_e$

$b_{300} = 0,20$ et $m_2^* = 0,70 m_e$ sur la figure VII-25

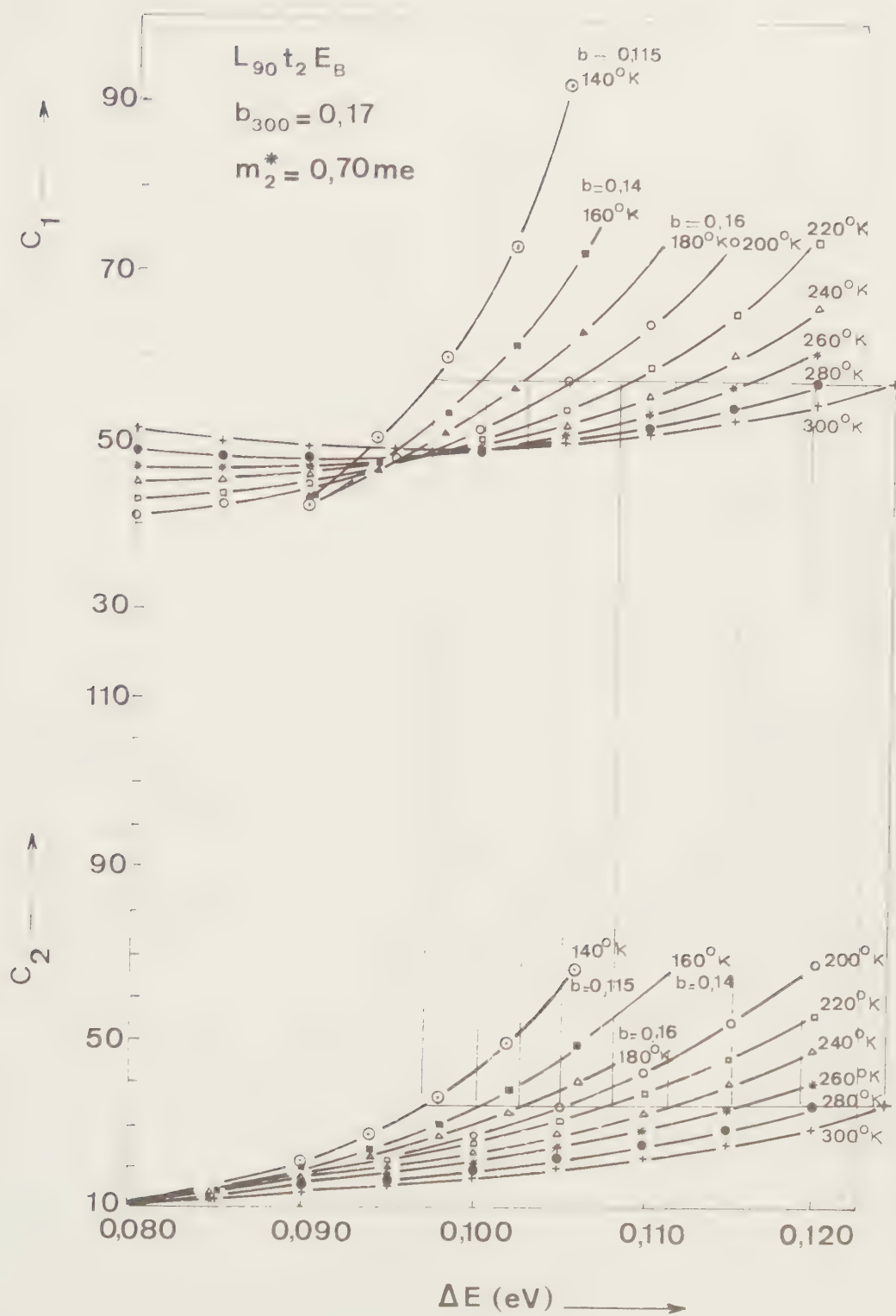


Fig:VII.23

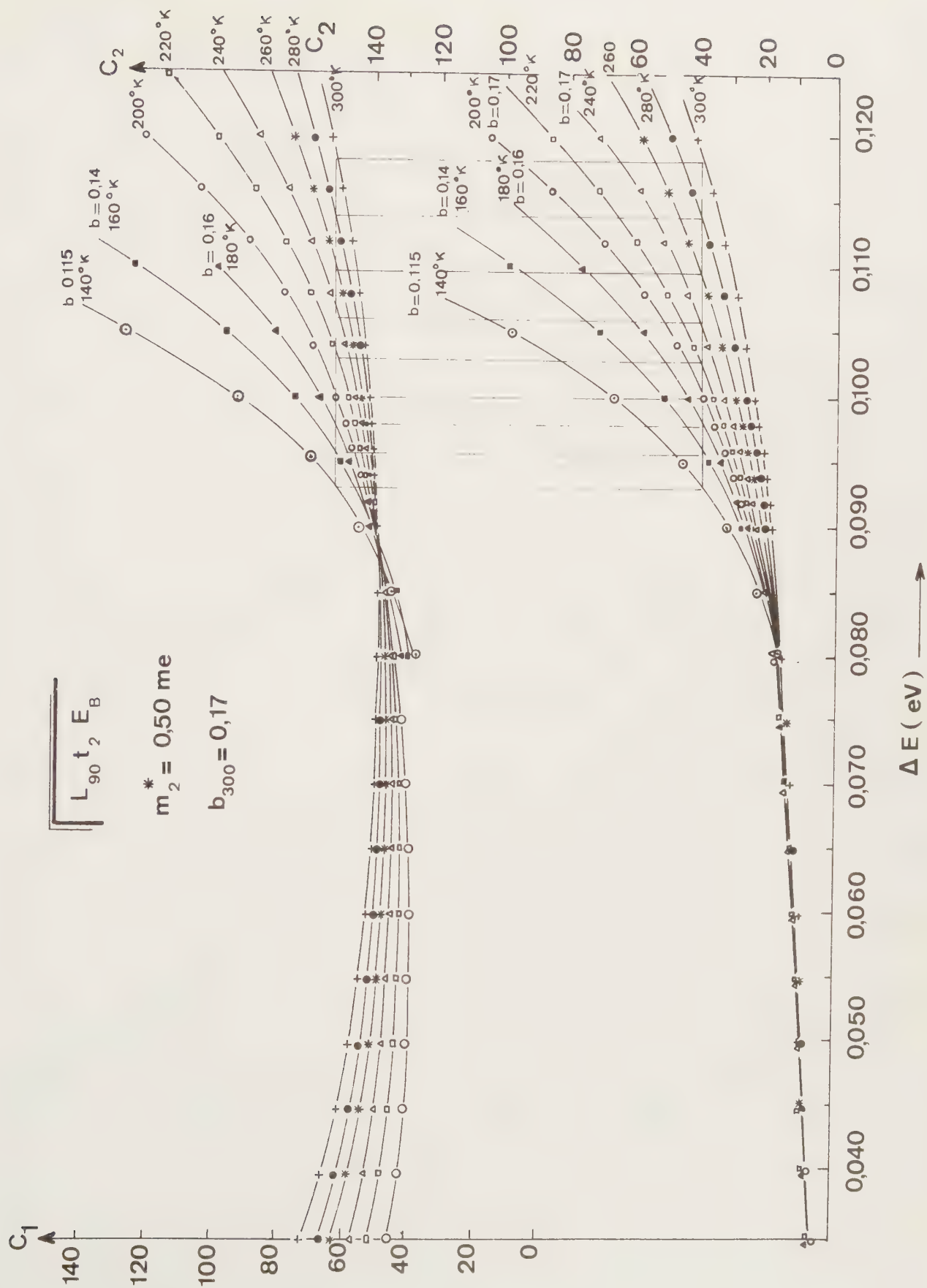


Fig: VII.24

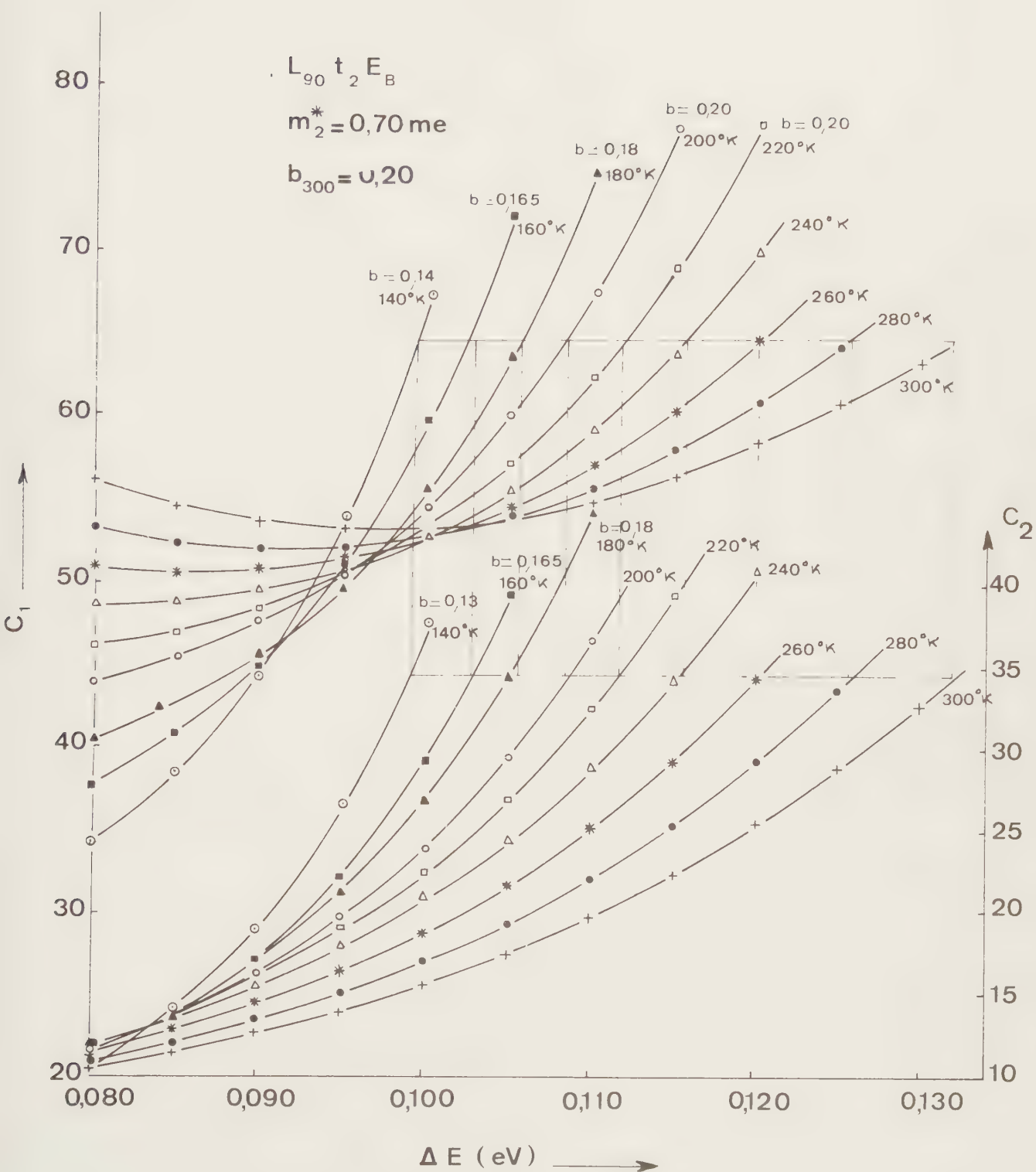


Fig: VII.25

Nous n'avons pas effectué les calculs pour des températures inférieures à 140°K bien que nous ayons travaillé jusqu'à 77°K car entre 300°K et 140°K nous sommes sûrs que la contribution prépondérante à la diffusion est due aux vibrations du réseau.

Au-dessous de 140°K la diffusion par les impuretés risque de ne pas être négligeable, ce qui entraîne la non validité de l'hypothèse $\tau = \tau(E)$ qui a servi de base à la théorie du coefficient de cisaillement. Les différents auteurs (11- 21- 23- 29- 45) admettent habituellement 100°K comme limite nous nous sommes volontairement tenus largement au-dessus pour diminuer les risques d'erreurs.

III-3- Résultats du calcul -

Il nous est tout d'abord possible de tracer les variations de b avec T pour un b initial de 0,17 et un b initial de 0,20 pour des masses effectives de densité d'états de 0,50 m_e et 0,70 m_e (fig: VII-26 et VII-27).

La figure VII-26 montre que le comportement de b avec T est peu sensible à la valeur choisie pour la masse effective de la bande (111).

Par ailleurs toujours pour l'échantillon $L_{go} T_2 E_B$, nous pouvons représenter la loi de variation de ΔE , différence d'énergie entre les bandes (111) et (000) du GaSb, avec la température pour différents couples de valeur de b et m_2^* .

La figure VII-28 donne cette loi de variation pour $m_2^* = 0,70$ b ayant les valeurs 0,14 - 0,17 et 0,20 à 300°K

Enfin pour préciser l'influence de m_2^* sur la loi de variation de ΔE , nous avons représenté la dépendance de ΔE à 300°K avec m_2 , b étant fixé à 0,17 (fig. VII-29).

Variation de $b = \mu_2 / \mu_1$ avec T

$$L_{90} t_2 E_B$$

$$m_2^* = 0,50. 0,70$$

$$b_{300} = 0,17$$

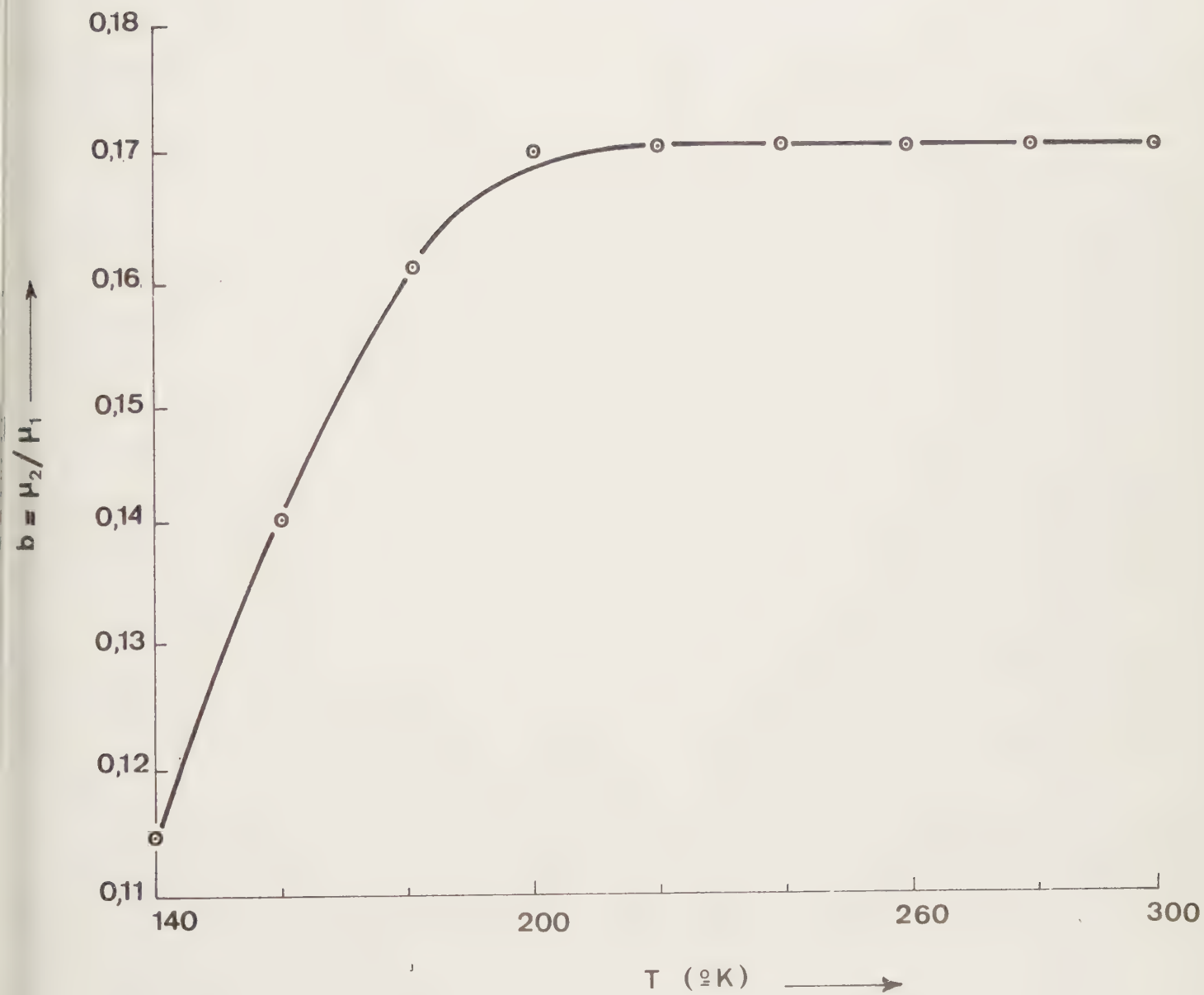


Fig : VII.26

Variation de $b \equiv \mu_2 / \mu_1$ avec T

$$L_{90} t_2 E_B$$

$$m_2^* = 0,50 \text{ à } 0,70$$

$$b_{300} = 0,20$$

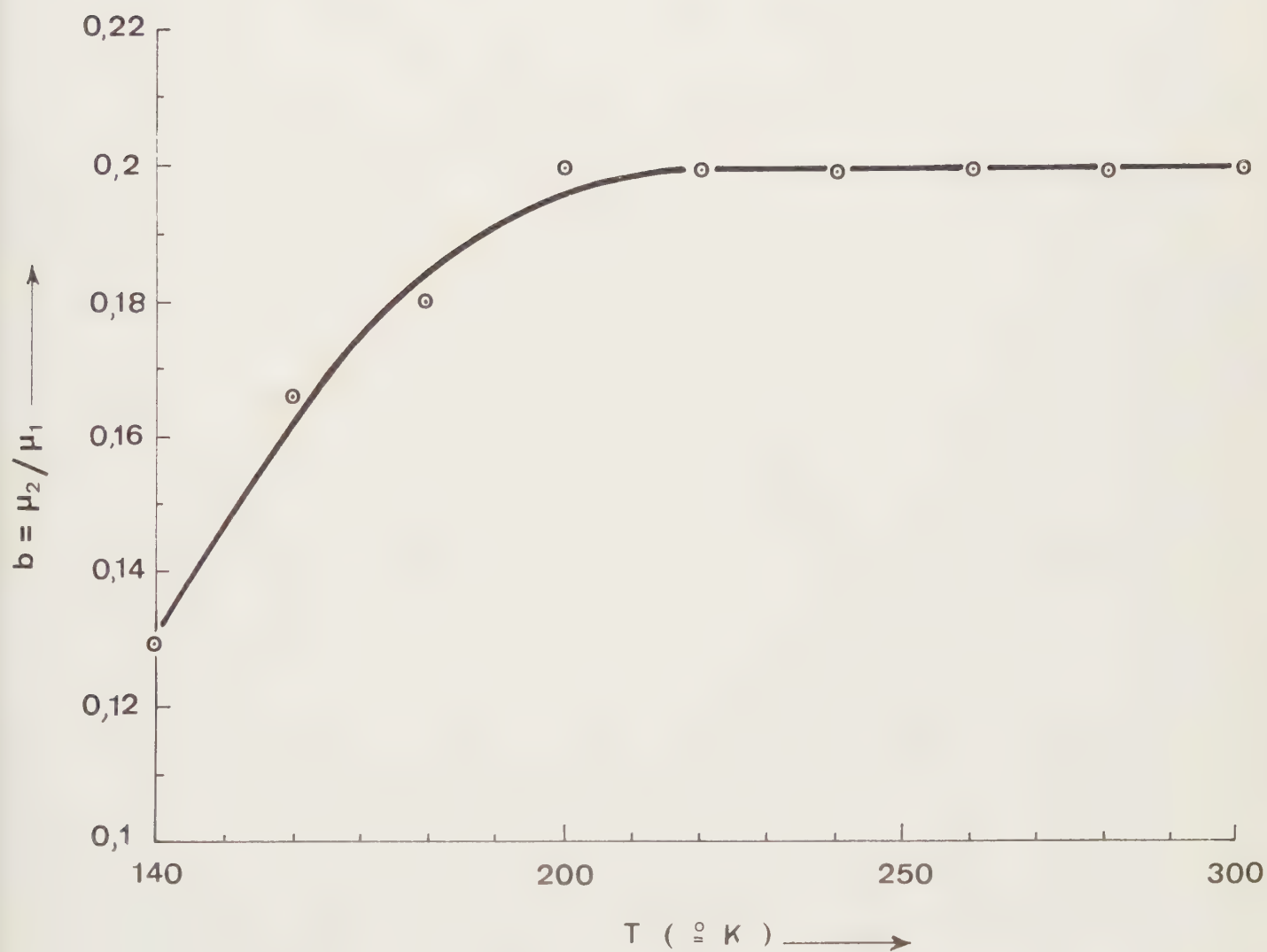


Fig :VII.27

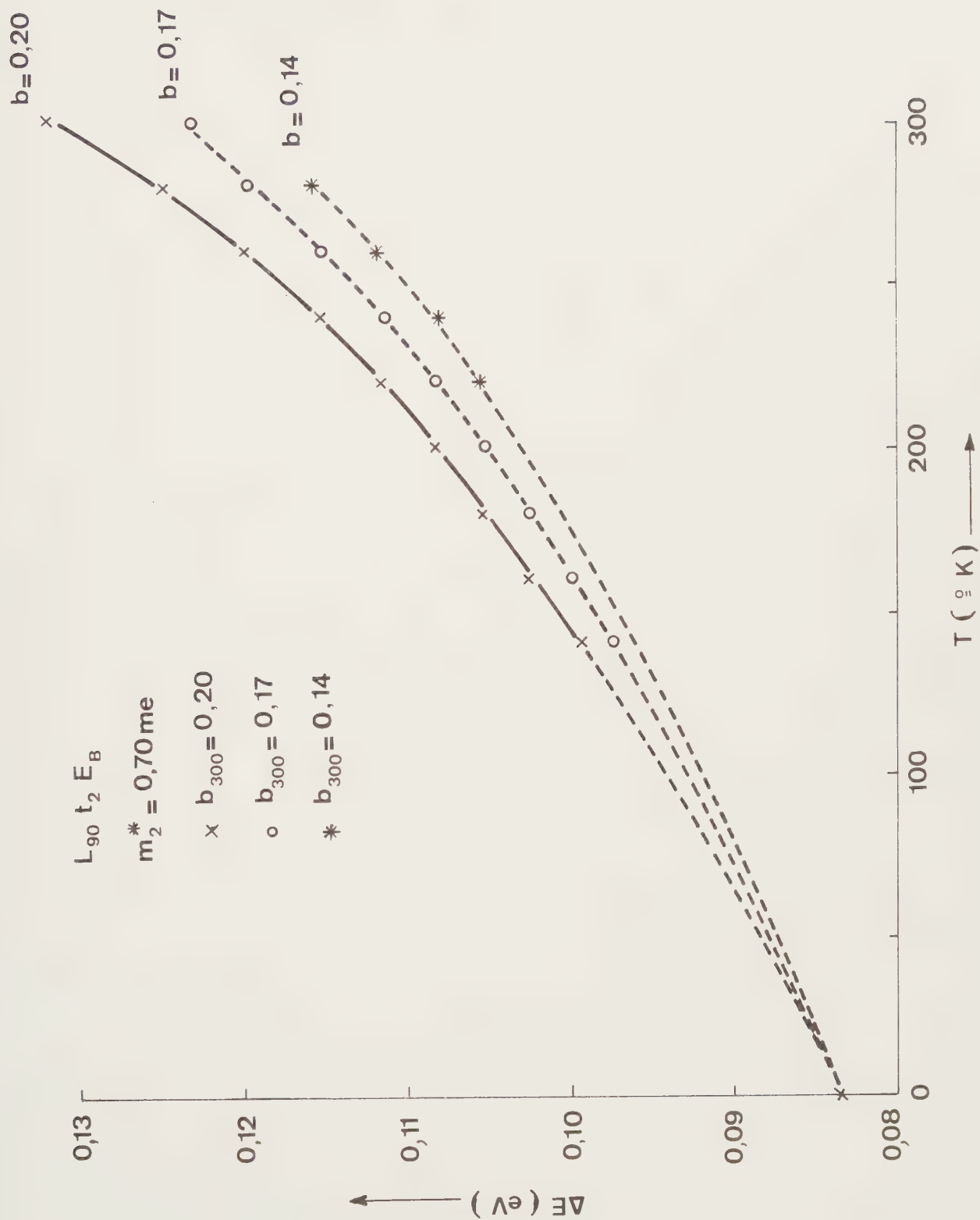


Fig : VII . 28

Variation de ΔE avec la masse effective de la bande (111)

à 300°K pour $b=0,17$



Fig :VII.29

Nous pouvons conclure de ces deux dernières figures que la fonction $\Delta E = f(T)$ est beaucoup plus sensible à la variation de b qu'à la variation de m_2^* , ce qui est en parfait accord avec les conclusions de KUDMAN et SEIDEL⁽⁴⁵⁾

Pour déterminer b_{300} , il faut m_2^* étant approximativement fixé, prendre plusieurs échantillons et opérer comme nous l'avons fait pour $L_{go} t_2^{E_B}$. Nous cherchons toutes les lois de ΔE en fonction de T pour toute la gamme de b , et si l'on admet que cette loi doit être identique pour tous les échantillons il faut chercher les b_{300} des différents échantillons donnant la même loi. En fait nous n'avons pas pu employer ce procédé, car nos échantillons sont : soit trop semblables à $L_{go} t_2^{E_B}$, soit trop dégénérés, et nous verrons que dans ce cas on ne peut pas adopter ce mode de calcul. Nous avons donc fixé arbitrairement $b = 0,17$ pour $L_{go} t_2^{E_B}$, en tenant compte toutefois des résultats trouvés par différents auteurs sur des échantillons semblables, par d'autres méthodes (1-6-9-10-27-43-32).

Nous avons représenté sur la fig. VII-30 la loi de variation des bords de bandes (000) et (111) avec la température pour $b = 0,17$, m_2^* variant de 0,30 à 0,70 m_e . Toutefois si nous voulons fixer avec plus de précision, l'influence de la température sur l'écart entre les bandes, il nous faut déterminer la masse effective de densité d'état m_2^*

III-4- Détermination de m_2^* -

Nous avons donné comme expression de la mobilité dans le cas de la diffusion par les vibrations du réseau,

$$\mu(\eta) = - \frac{2}{3} \frac{e \langle \tau \rangle}{m_c^*} \frac{F_0(\eta)}{F_{1/2}(\eta)}$$



Fig: VII.30

et par conséquent, le rapport des mobilités des deux bandes (000) et (111) est

$$b = \frac{\mu_2}{\mu_1} = \frac{\tau_2}{\tau_1} \frac{m_{1c}^*}{m_{2c}^*} \frac{F_0(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)}$$

Dans le cas d'un échantillon suffisamment dégénéré pour que le niveau de Fermi ait une énergie supérieure à l'énergie des deux bords de bande, nous pouvons considérer que les temps de relaxation moyens sont pratiquement égaux aux temps de relaxation au niveau de Fermi, commun aux deux bandes. La relaxation se produisant principalement vers des états proches du niveau de Fermi et dépendant uniquement de l'énergie, on peut admettre pour de tels échantillons que les temps de relaxation τ_1 et τ_2 sont pratiquement égaux et par suite que :

$$b = \frac{m_{1c}^*}{m_{2c}^*} \frac{F_0(\eta_2)}{F_{1/2}(\eta_2)} \frac{F_{1/2}(\eta_1)}{F_0(\eta_1)} \quad \text{VII-16}$$

Si donc sur un échantillon reconnu dégénéré on détermine b , η_1 et η_2 on tirera m_{2c}^* de l'équation précédente.

Or nous savons que la masse effective de conduction, m_{2c}^* est reliée à la masse effective de densité d'état m_2^* par les relations :

$$\frac{1}{m_{2c}^*} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{m_L^*} + \frac{2}{m_T^*} \right] \quad \text{VII-17}$$

$$\text{et} \quad m_2^{*3/2} = N_V m_L^{*1/2} m_T^* \quad \text{VII-18}$$

Alors que pour la bande sphérique $m_{1c}^* = m_1^*$

Par conséquent en l'absence de toute hypothèse sur l'anisotropie des ellipsoïdes (111), il nous est impossible de déterminer m_2^* connaissant m_{2c}^* . Aussi nous avons adopté le raisonnement suivant :

Si nous prenons la masse effective de densité d'états m_2^* trouvée par divers auteurs (3) (5) (6) obtenant une loi de variation $\Delta E = f(t)$ proche de celle que nous obtenons (qui est peu sensible à la valeur de m_2^*), nous pouvons sur un échantillon dégénéré, déterminer la valeur de b , η_1 et η_2 et par conséquent grace à la relation VII-16, calculer m_{2c}^* d'une manière indépendante.

Si la valeur trouvée pour m_{2c}^* est en accord avec celle donnée par ces mêmes auteurs, nous aurons alors de bonnes raisons de croire que la valeur de m_2^* choisie est convenable. La valeur de m_2^* choisie est de $0,70 m_e$

Nous avons pris comme échantillon, l'échantillon $L_{87}t_3E_C$ qui possède un faible coefficient de Hall. Du fait de sa plus grande dégénérescence, lorsque nous traçons les isothermes C_1 et C_2 , nous obtenons des courbes très aplaties, ce qui rend imprécise la détermination et l'ajustement de b par la méthode graphique.

Si l'on admet alors que la loi de variation $\Delta E = f(t)$ d'une part et C_1 , C_2 d'autre part, sont indépendants de l'échantillon utilisé, nous pouvons injecter cette loi et ces valeurs tirées des échantillons moins dégénérés, en même temps que les données expérimentales sur l'échantillon $L_{87}t_3E_C$, dans les équations (VII-6... VII-13).

On peut ainsi, en prenant $m_2^* = 0,70 m_e$ calculer b à différentes températures pour $L_{87}t_3E_C$. La variation de b avec T , pour cet échantillon est donnée sur la fig. VII-31. Nous constatons que b décroît d'abord avec la température pour tendre finalement vers une valeur constante égale à $0,10$ aux basses températures ; dans le domaine s'étendant de 200 à $140^\circ K$ cet échantillon est effectivement dégénéré, et le calcul nous donne pour η_1 et η_2 à $140^\circ K$, les valeurs positives suivantes :

$$\eta_1 = 8,25$$

$$\eta_2 = 0,0606$$

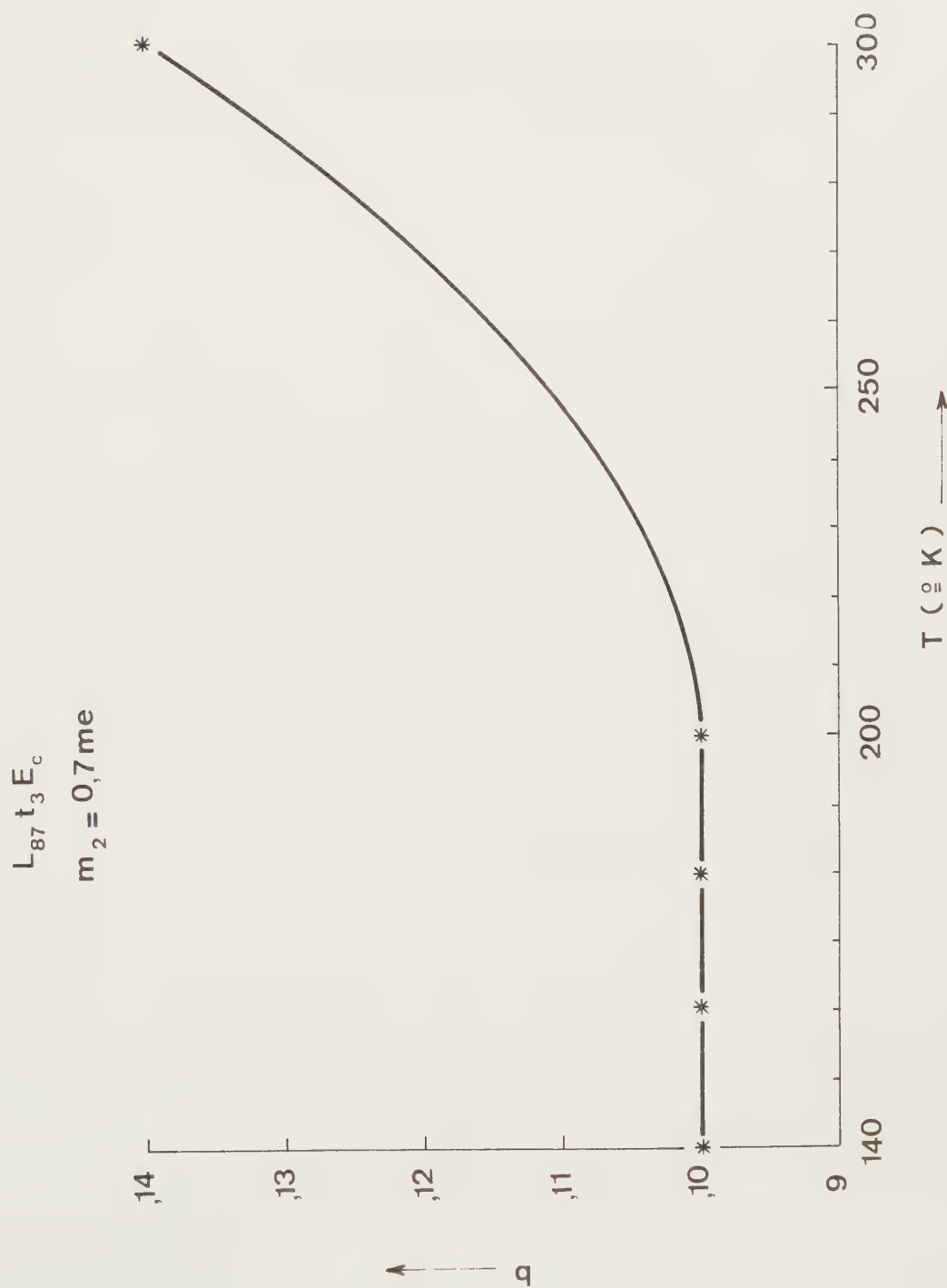


Fig: VII.31

De l'équation VII-16, prise avec $b = 0,10$, nous tirons alors

$$m_{2c}^* = 0,185 m_e$$

ce qui est en bon accord avec la valeur trouvée par les auteurs déjà cités. Les équations VII-17 et VII-18 nous permettent d'obtenir

$$m_L^* = 1,3 m_e$$

et $m_T^* = 0,12 m_e$

Soit une anisotropie $K = \frac{m_L^*}{m_T^*}$ de l'ordre de 10

Nous remarquons que cette valeur trouvée pour K justifie l'approximation faite précédemment $\frac{1+4K}{1+2K} \simeq 2$

Nous retiendrons donc la valeur $m_2^* = 0,70 m_e$ pour la masse effective de densité d'états de la bande (111) du GaSb. Avec cette valeur de m_2^* et $b = 0,17$ nous pouvons calculer par conséquent sur l'échantillon $L_{go} t_2 E_B$ les deux quantités C_1 et C_2 pour lesquelles nous trouvons alors

$$C_1 = \frac{d\Delta E}{dp} = -5,7 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atm} \simeq 6 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atm}$$

et $C_2 = E_u \frac{K-1}{2K+1} = 34 \text{ eV}$

La fig. VII-32 représente la variation des bords de bande (000) et (111) avec la pression. Si on la compare avec la variation des bords de bande avec la température (fig. VII-30) on constate que $\frac{d\Delta E}{dp}$ et $\frac{d\Delta E}{dT}$ ont le signe contraire. Un tel résultat était prévisible ; en effet, l'application

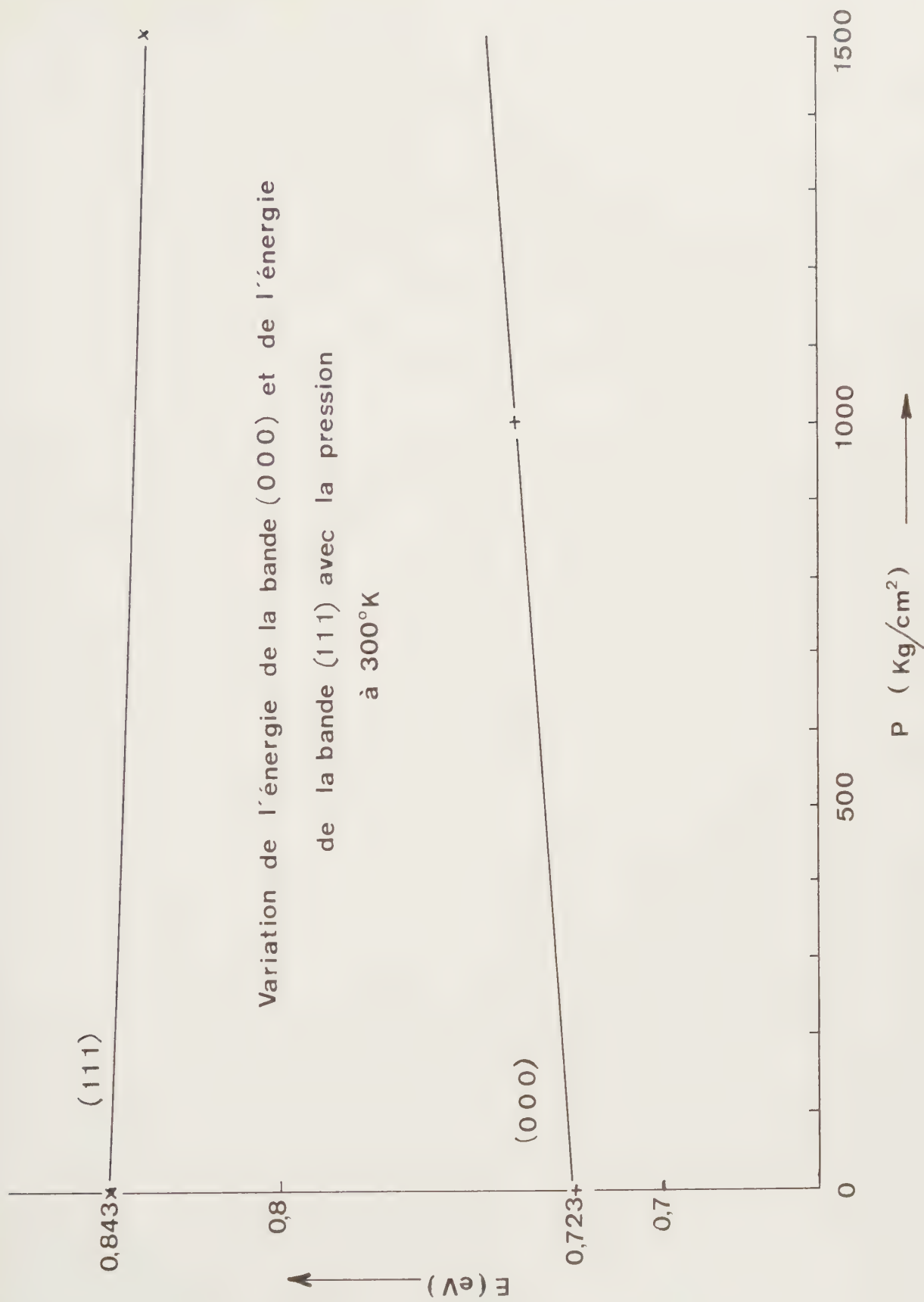


Fig : VII.32

Les figures VII-33 et VII-34 représentent ces résultats pour un échantillon moyennement dopé ($L_{90}t_2E_B$) et un échantillon fortement dopé ($L_{87}t_3E_C$).

Nous constatons que n_2 croît avec la température et ce d'autant plus vite que l'échantillon est moins dégénéré. Le nombre total de porteurs croît avec la température ; pour l'échantillon le plus dopé $L_{87}t_3E_C$ il croît très lentement puisqu'il varie de $5,2$ à $5,5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$ de 140 à 300°K ce qui confirme l'hypothèse faite par certains auteurs concernant la non dépendance du nombre total de porteurs avec la température pour des échantillons dégénérés.

Notons également que la fig. VII-31 confirme l'hypothèse que lorsque l'échantillon est totalement dégénéré le rapport des mobilités $\frac{\mu_2}{\mu_1} = b$ reste constant.

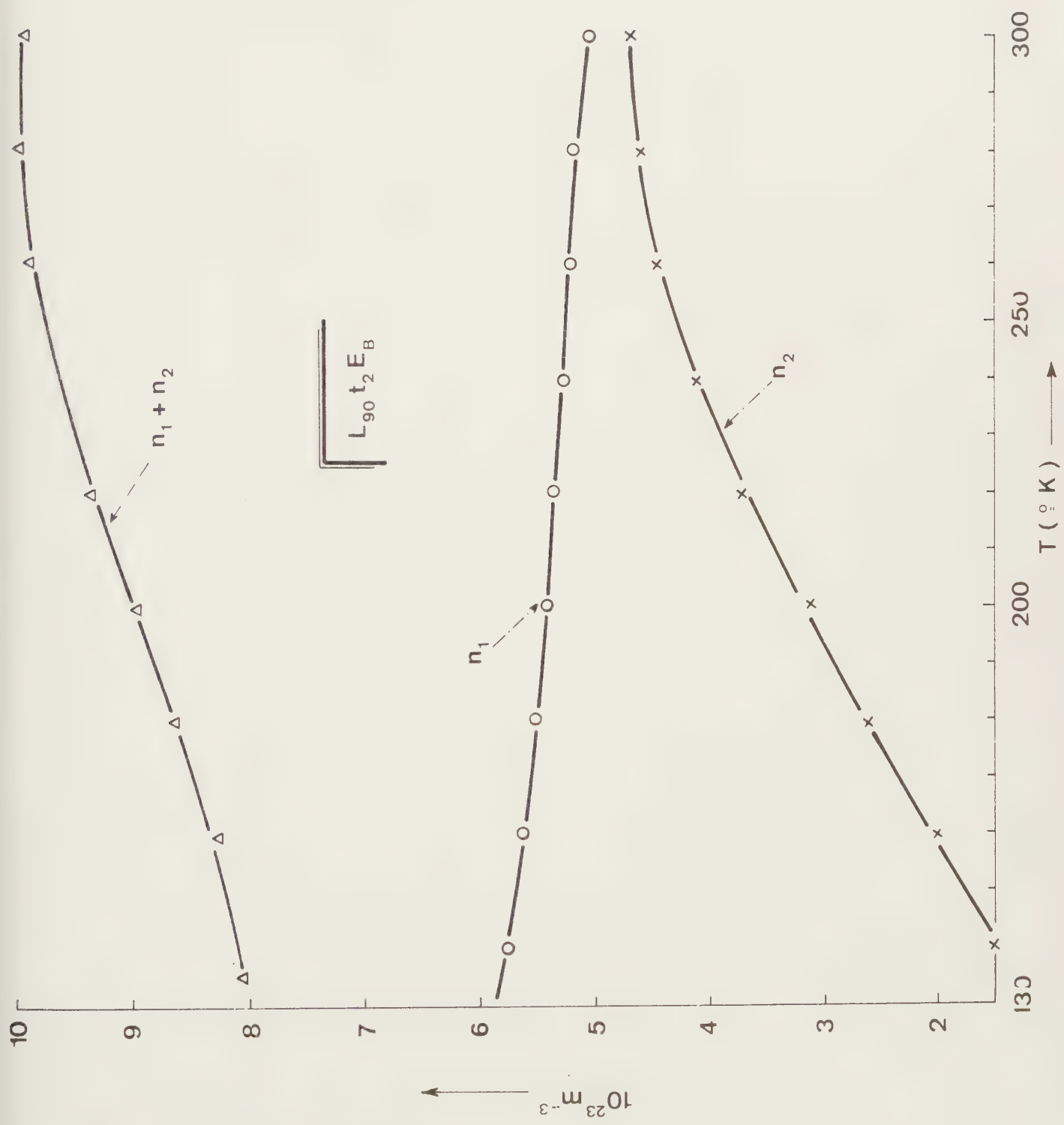


Fig : VII .33

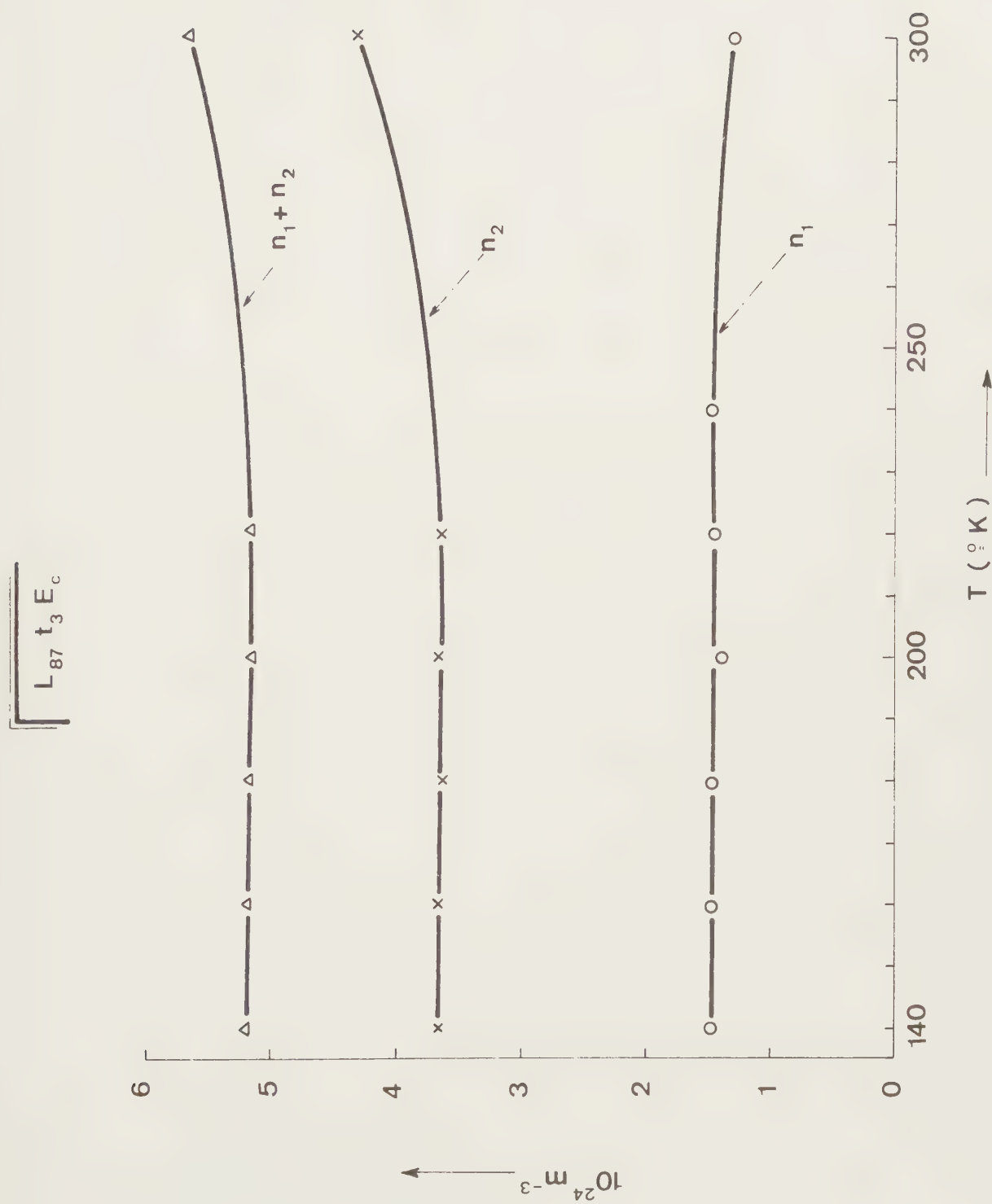


Fig: VII .34

C O N C L U S I O N

Nous avons dans une première partie, mis au point et exposé d'une manière détaillée la théorie de la piezorésistance dans un matériau semi-conducteur sur la base d'un modèle théorique à deux sous bandes de conduction dont l'une est multivallée en insistant sur les hypothèses et les approximations faites dans les divers processus envisagés. Nous avons ensuite montré comment des mesures de piezorésistance sous contrainte uniaxiale et pression hydrostatique nous permettaient d'atteindre expérimentalement les coefficients isotrope et de cisaillement dont les expressions théoriques découlaient du modèle choisi.

Nous avons vérifié que le comportement de ces coefficients de piezorésistance lorsque la température varie pouvait s'expliquer, dans le cas du GaSb, avec le modèle théorique adopté, en prenant comme sous bande de conduction d'énergie inférieure la bande (000) et comme sous bande multivallée la bande (111).

Enfin une méthode de calcul originale basée sur l'utilisation des mesures de piezorésistance sous contrainte uniaxiale et hydrostatique associées à des mesures de coefficient de Hall et de conductivité et effectuée en fonction de la température, nous a permis de déterminer les caractéristiques suivantes de la sous bande (111).

a) La loi de variation avec T de la différence d'énergie entre les sous bandes (000) et (111) ΔE , est une loi positive, mais elle n'est pas exactement linéaire ; la variation de ΔE avec T paraissant plus rapide aux hautes températures. A 300°K, nous obtenons $\frac{d\Delta E}{dT} = +2 \cdot 10^{-4} \text{ eV/°K}$

b) A 300°K nous trouvons un ΔE de l'ordre de 0,120 eV ce qui est en bon accord avec les résultats de EDWARDS et DRICKAMER⁽⁴⁷⁾ et relativement proche des résultats de BORDURE⁽⁶⁾ et de HARLAND et WOOLLEY⁽⁵⁾.

c) La masse effective de densité d'états pour la bande de conduction (111) qui est compatible avec l'ensemble des résultats obtenus, est voisine de 0,70 m_e .

d) Nous trouvons dans ces conditions une masse effective de conduction pour cette bande (111) $m_{2c} = 0,185 m_e$.

e) Les électrons dans l'une des vallées de la sous bande multivallée ont une masse effective longitudinale $m_L \simeq 1,40 m_e$ et transversale $m_T \simeq 0,13 m_e$. Ces résultats sont également proches de ceux obtenus par BORDURE⁽⁶⁾ et HARLAND et WOOLLEY⁽⁷⁾.

f) Nous obtenons un taux de variation de ΔE avec la pression de :

$$\frac{d\Delta E}{dp} = - 1,57 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atm} \simeq - 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ eV/atm}$$

g) La constante B_U du potentiel de déformation pour la bande (111) est trouvée égale à 79 eV

Ces résultats sont obtenus en adoptant les données suivantes :

$$(E_{g1})_{0K} = 0,813 \text{ eV}$$

$$\left(\frac{dE_{g1}}{dT} \right) = -3,10^{-4} \text{ eV}$$

$$m_1 = 0,047 m_e$$

$$C_{44} = 4,32 \cdot 10^{11} \text{ dynes/cm}^2$$

DISK OPERATING SYSTEM/360 FORTRAN 360N-FO-451 30

```

C EFFET HALL DANS LE GASE L90 T2 EB
  READ(1,1)H,FK,FME,E,C44
  1 FORMAT(5E10.0)
  READ(1,2)PI,DE300,DE280,FKT
  2 FORMAT(4F10.0)
  FM1=0.047*FME
  FM2=0.50*FME
  RHEXP=8.95E-06
  BETA=0.17
80 T=300.
45 READ(1,3)SIGMA,PIP,PI S
  3 FORMAT(3E10.0)
  GAM=(2.*FK*T)**(1.5)
  FK2=FKT*T/300.
  DELTE=0.030
  DE=DELTE/FK2
44 ETA1=-0.750
25 ETA2=ETA1-DE
  FJ=0.5
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FF1)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FF2)
  FN1=4.*PI*GAM/H*(FM1**(1.5))/H*FF1/H
  FN2=4.*PI*GAM/H*(FM2**(1.5))/H*FF2/H
  ALF=FN2/FN1
  FN=FN1+FN2
  RF=(1.+ALF*(BETA)**2)*(1.+ALF)/FN/((1.+ALF*BETA)**2)/1.6E-19
  EPS=RHEXP/100.
  IF(ABS(RH-RHEXP)-EPS)10,10,12
12 ETA1=ETA1+0.010
  IF(ETA1-5.0)25,25,27
10 FJ=-0.5
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FF1M)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FF2M)
  FMU1=SIGMA/FN1/(1.+ALF*BETA)/E
  FMU2=BETA*FMU1
  SIGM2=E*FN2*FMU2
  ALFF2=ALF*FF2M/FF2
  DAF=ALFF2*FF1/FF1M
  FJ=0.
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FUN01)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FUN02)
  FJ=-1.
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FUN1)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FUN2)
  AB=ALF*BETA
  R1=FF1/FF1M
  R2=FF2M/FF2
  RF1=FUN1/FUN01
  RF2=FUN2/FUN02
  DEG1=1.57E-5
  EG1=0.813-3.E-4*T
  EG2=EG1+DELTE
41 C1120=(PIP+DEG1/(1.+AB))*(1./EG1+AB/EG2))*(1.+AB)/(-AB/EG2+ALF/
  4FK2/(1.+DAF))*((1.-BETA)/2.*R2+R1*R2*(RF1-1./2./R1)-BETA*(RF2-R2/

```


07/05/69

FORTMAIN

52.)))

C2120=-6.*PI S*FK2*C44*FF2/FF2 M*SIGMA/SIGM2

WRITE(3,20)ETA1,ETA2,FN1,FN2,FN

WRITE(3,21)ALF,BETA,RH,RHEXP,DELTE

WRITE(3,23)C1120,C2120,FMU1,FMU2

23 FORMAT(2X,6HC1120=,E13.7,5X,6HC2120=,E13.7,10X,2(E13.7,2X))

21 FORMAT(2X,4HALF=,E13.7,2X,2HB=,F10.6,17X,3HRH=,E13.7,2X,6HREXP=,
1E13.7,2X,6HDELTE=,F9.6)20 FORMAT(2X,5HETA1=,F8.4,2X,5HETA2=,F8.4,2X,3HN1=,E14.7,2X,3HN2=,
1E14.7,2X,2HN=,E14.7)

WRITE(3,8)

8 FORMAT(1H)

DELTE=DELTE+0.005

IF(DELTE-0.080)60,60,81

60 DE=DELTE/FK2

GO TO 25

81 T=T-20.

IF(T-140.)27,46,46

46 READ(1,4)SIGMA,PIP,PI S

4 FORMAT(3E10.0)

GAM=(2.*FK*T)**(1.5)

FK2=FKT*I/300.

DELTE=0.030

DE=DELTE/FK2

GO TO 44

27 STOP

END

DISK OPERATING SYSTEM/360 FORTRAN 360N-FO-451 30

```
SUBROUTINE FERMI (FJ,ETA,FERMI)
  FA=0.
  FB=40.**FJ/(EXP(40.-ETA)+1.)
  S=FA+FB
  DO 10 I=1,79,2
    E=I/2.
    F1=E**FJ/(EXP(E-ETA)+1.)
10  S=S+4.*F1
    DO 20 J=2,78,2
      X=J/2.
      F2=X**FJ/(EXP(X-ETA)+1.)
20  S=S+2.*F2
  FERMI=1./6.*S
  RETURN
  END
```



```

C EFFET HALL DANS LE GASB L87 T3 EC
  READ(1,1)H,FK,FME,E,C44
  1 FORMAT(5E10.0)
  READ(1,2)PI,DE300,DE280,FKT
  2 FORMAT(4F10.0)
  FM1=0.047*FME
  FM2=0.70*FME
44 ETA1=2.900
80 T=300.
45 READ(1,3)SIGMA,PIP,PI S,RHEXP,DELTE
  3 FORMAT(5E10.0)
  BETA=0.14
  GAM=(2.*FK*T)**(1.5)
  FK2=FKT*T/300.
  DE=DELTE/FK2
25 ETA2=ETA1-DE
  FJ=0.5
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FF1)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FF2)
  FN1=4.*PI*GAM/H*(FM1**(1.5))/H*FF1/H
  FN2=4.*PI*GAM/H*(FM2**(1.5))/H*FF2/H
  ALF=FN2/FN1
  FN=FN1+FN2
  RH=(1.+ALF*(BETA)**2)*(1.+ALF)/FN/((1.+ALF*BETA)**2)/1.6E-19
  EPS=RHEXP/100.
  IF(ABS(RH-RHEXP)-EPS)10,10,12
12 ETA1=ETA1+0.01
  IF(ETA1-9.0)25,25,27
10 FJ=-0.5
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FF1M)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FF2M)
  FMU1=SIGMA/FN1/(1.+ALF*BETA)/E
  FMU2=BETA*FMU1
  SIGM2=E*FN2*FMU2
  ALFF2=ALF*FF2M/FF2
  DAF=ALFF2*FF1/FF1M
  FJ=0.
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FUNOI)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FUNO2)
  FJ=-1.
  CALL FERMI (FJ,ETA1,FUN1)
  CALL FERMI (FJ,ETA2,FUN2)
41 AB=ALF*BETA
  R1=FF1/FF1M
  R2=FF2M/FF2
  RF1=FUN1/FUNOI
  RF2=FUN2/FUNO2
  DEG1=1.57E-5
  EG1=0.813-3.E-4*T
  EG2=EG1+DELTE
  CI300=((PIP+DEG1/(1.+AB))*(1./EG1+AB/EG2))*(1.+AB)/(-AB/EG2+ALF/
4FK2/(1.+DAF))*((1.-BETA)/2.*R2+R1*R2*(RF1-1./2./R1)-BETA*(RF2-R2/
52.)))
C 2300=-6.*PI S*FK2*C44*FF2/FF2M*SIGMA/SIGM2

```


06/06/69

FORTMAIN

```
      WRITE(3,97) T
97  FORMAT(20X,2HT=,F9.2)
      WRITE(3,20) ETA1,ETA2,FN1,FN2,FN
      WRITE(3,21) ALF,BETA,RH,RHEXP,DELTE
      WRITE(3,23) CI300,C2300,FMU1,FMU2
23  FORMAT(2X,6HC I300=,E13.7,5X,6HC2300=,E13.7,10X,2(E13.7,2X))
21  FORMAT(2X,4HALF=,E13.7,2X,2HB=,F10.6,17X,3HRH=,E13.7,2X,6HREXP=,
      1E13.7,2X,6HDELTE=,F9.6)
20  FORMAT(2X,5HETA1=,F8.4,2X,5HETA2=,F8.4,2X,3HN1=,E14.7,2X,3HN2=,
      1E14.7,2X,2HN=,E14.7)
      WRITE(3,8)
8  FORMAT(1H )
      BETA=BETA-0.01
      IF(BETA-0.05) 81,25,25
81  T=T-20.
      IF(T-140.) 27,46,46
46  ETA1=ETA1-0.500
      GO TO 45
27  STOP
      END
```


B I B L I O G R A P H I E

- 1 A. SAGAR, Phys. Rev. 117, 93, (1960)
- 2 M. CARDONA J. Phys. Chem. 17, 336 , (1961)
- 3 C.Y. LIANG, J. Appl. Phys. 39, 3866 (1968)
- 4 J.E. ROBINSON and S. RODRIGUES, Phys. Rev. 135, A 779 (1964)
- 5 H.B. HARLAND and J.C. WOOLLEY Can. J. of Phys. 44, 2715 (1966)
- 6 G. BORDURE Thèse d'Etat Montpellier , Mars 1969
- 7 B. PISTOULET et H. MATHIEU, Proceedings of the international conference on the physics of semiconductors -(1968)
- 8 B. PISTOULET, J.L. ROBERT and D. BARJON, Proceeding of the international conference of the physics of semiconductors (1968)
- 9 B.B. KOSICKI and W. PAUL , Phys. Rev. Let. 17, 246, (1966)
- 10 B.B. KOSICKI , W. PAUL, A.J. STRAUSS and G.W. ISELER, Phys. Rev. Let. 17, 1176, (1966)
- 11 B.B. KOSICKI, Clearinghouse for Federal scientific and technical information - A.D. 656, 590 June (1967)
- 12 M. AVEROUS and G. BOUGNOT, Phys. Stat. Sol. 21, 665 (1967)
- 13 C. HERRING, Bell syst. J. 34, 237 (1955)
- 14 C. HERRING and E. VOGT Phys. Rev. 101, 944 (1956)
- 15 J. BARDEEN and W. SCHOCKLEY Phys. Rev. 80, 72 (1950)
- 16 E. DURAND Electrostatique et magnetostatique Ed. Masson et Cie 141 - (1953)
- 17 C. SMITH, Phys. Rev. 94, 42 (1954)
- 18 S. TIMOSHENKO and J.N. GOODIER, Theorie of elasticity Mc, Graw Hill Book company , Inc. 231 (1961)

- 19 J.C. SLATER, Quantum th orie of molecules and solids
Mc, Graw Hill book company , Inc, (1965)
- 20 H.M. JAMES, Phys. Rev. 76, 1611, (1949)
- 21 J.M. ZIMAN, Electrons and phonons , Oxford university press (1963)
- 22 F. SEITZ, Phys. Rev. 79 - 372, (1950)
- 23 H. BROOKS, Advances in electronics and electron physics vol. 7
Academic press In New York (1955)
- 24 E. CONWELL and WEISSKOPF, Phys. Rev. 77, 388 (1950)
- 25 H.S.W. MASSEY and B.L. MOISEWITCH, Phys. Rev. 78, 180, (1950)
- 26 C. HERGINSOY, Phys. Rev. 79, 1013 (1950)
- 27 R.W. KEYES, Sol. Stat. Phys. 11, 149 (1960)
- 28 P.J. LIN and L. KLEINMAN Phys. Rev. 142, 478 (1966)
- 29 A.C. BEER, Sol. Stat. Phys. Sup. 4 109 -(1963)
- 30 J.H. TAYLOR, Bull. Am. Phys. Soc. 3, 121 (1959)
- 31 Mc. DOUGALL and STONER, Phil. Trans. Roy. Soc. London
A. 237, 67, (1938)
- 32 J.L. ROBERT, Th ese d'Etat , Montpellier (1969)
- 33 M. MARQUES, Th ese de Sp cialit , Montpellier (1967)
- 34 J.F. LEHIR, Th ese d'Etat , Paris (1966)
- 35 J. ROBIN, Th ese d'Etat , Paris, (19)
- 36 VAN DER PAW, Phillips Res. Repts. 13-1- (1958)
- 37 F.J. MORIN, Phys. Rev. 93, 62 (1954)
- 38 F.J. MORIN, T.H. GEBALLE and C. HERRING, Phys. Rev. 105, 525 (1957)
- 39 R.W. KEYES and M. POLLAK, Phys. Rev. 118, 1001 (1960)
- 40 M. POLLAK, Phys. Rev. 111, 798 (1958)
- 41 J.R. BURKE, Phys. Rev. 160, 636 (1967)
- 42 J. CALAS, Th ese de Sp cialit , Montpellier, (1969)
- 43 O. MADELUNG, Physics of III-V compounds J. Wiley and sons
N.Y. 130 (1964)

- 44 BALKANSKY - Table de constantes
- 45 I. KUDMAN and T.E. SEIDEL, J. Appl. Phys. 38, 4379 (1967)
- 46 D.F. EDWARDS, T.E. SZYKHOUSE, H.G. DRICKAMER, J. Phys.,
Chem. Solids, 11, 140 (1958)

LISTE DES PRINCIPAUX SYMBOLES UTILISES

$\vec{E}$	vecteur champ électrique
$\vec{J}$	vecteur densité de courant
$\vec{H}$	vecteur champ magnétique
K	tenseur de contrainte
ϵ	tenseur de déformation
σ	conductivité
ρ	résistivité
R_H	constante de Hall
Π	tenseur de piezorésistance
Π_t	piezorésistance longitudinale
Π_L	piezorésistance transversale
O	Opérateur
$\vec{u}$	Vecteur unité
$\vec{F}$	vecteur force
E_F	énergie du niveau de Fermi
E_C	énergie de la bande de conduction
E	Energie
$m(K)$	tenseur d'élastorésistance
	constante de potentiel de déformation due à une dilatation
	constante de potentiel de déformation due à un cisaillement
$\vec{k}$	vecteur d'onde
$\frac{dE}{dp}$	variation de la différence d'énergie entre les bandes (000) et (111) avec la pression
C_2	$= \frac{K-1}{2K+1}$
	fonction de Fermi
τ	temps de relaxation

χ	coefficient de compressibilité
α	coefficient d'expansion thermique
n	$= \frac{E_F - E_C}{kT}$
μ	mobilité
m_c	masse effective de conduction
m	masse effective de densité d'états
m_e	masse de l'électron libre
	Hamiltonien
K	coefficient d'anisotropie
k	constante de Boltzmann
h	constante de Planck

TABLE DES MATIERES

CHAPITRE I - INTRODUCTION	1
CHAPITRE II- PHENOMENOLOGIE DE LA PIEZORESISTANCE	3
1 - Tenseur de résistivité et de contrainte	4
2 - Tenseur de piezorésistance	6
3 - Contrainte uniaxiale	11
4 - Contrainte isotrope	20
CHAPITRE III - COEFFICIENT DE CISAILLEMENT	23
1 - Modèle multivallée	23
2 - Potentiel de déformation	27
3 - Processus de diffusion des électrons	39
4 - Conductivité	44
5 - Etude de la piezorésistance dans une bande multivallée	56
CHAPITRE IV - Théorie du coefficient isotrope	71
1 - Introduction	71
2 - Piezorésistance due à la variation des populations	73
3 - Piezorésistance due à la variation des mobilités	81

CHAPITRE V - THEORIE SOMMAIRE DE L'EFFET HALL	91
1 - Approximation sphérique	91
2 - Double bande de conduction	95
 CHAPITRE VI - TECHNIQUES EXPERIMENTALES	 99
1 - Echantillons	99
2 - Dispositif pour pression hydrostatique	101
3 - Dispositif pour contraintes uniaxiales	107
4 - Dispositif pour mesures électriques	111
5 - Dispositif pour mesures de résistivité et d'Effet Hall	 115
 CHAPITRE VII - RESULTATS EXPERIMENTAUX ET INTERPRETATION	 120
1 - Résultats expérimentaux	120
2 - Interprétation	130
3 - Exploitation des résultats	144
 CHAPITRE VIII - CONCLUSION	 180
 ANNEXE - Programmes de calcul	 182
 BIBLIOGRAPHIE	 187
 LISTE DES PRINCIPAUX SYMBOLES UTILISES	 190
 TABLE DES MATIERES	 192

Vu et permis d'imprimer
MONTPELLIER, le

Le Recteur de l'Académie
de Montpellier

Vu et approuvé
MONTPELLIER, le

Le Doyen de la Faculté
des Sciences

